

**ESTUDIO INTRODUCTORIO AL MODELADO Y SIMULACIÓN DE REDES
DE NANOTUBOS DE CARBONO ALEATORIOS, COMO ELECTRODO
TRANSPARENTE PARA CELDAS SOLARES ORGÁNICAS**

SALAS REDONDO CATERIN YOJANA

DIRECTOR:

PhD. JOSE LUIS VILLA RAMIREZ

ASESOR:

PhD. ALBA AVILA BERNAL

**INFORME DE INVESTIGACION PRESENTADO COMO REQUISITO PARA
OPTAR AL TITULO DE INGENIERO ELECTRICISTA**

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROGRAMA DE ELÉCTRICA Y ELECTRÓNICA
CARTAGENA DE INDIAS D. T. Y C.
MARZO DEL 2012**

FICHA DE DATOS RESUMEN DEL INFORME FINAL

Título del Proyecto: Estudio introductorio al modelado y simulación de Redes de Nanotubos de Carbono aleatorios, como Electrodo Transparente para Celdas Solares Orgánicas.

Resumen: En el presente informe se describe los resultados obtenidos durante las pasantías de investigación realizadas en el Grupo de investigación en Automatización Industrial y Control “GAICO” con asesoramiento del Centro de Micro y Nanotecnología de la Universidad de los Andes. En dicha pasantía se realizó el estudio del modelamiento de electrodos de nanotubos de carbono (CNT) para celdas solares orgánicas, el cual será la base de partida para el posterior modelamiento de la interfaz de la celda solar y así determinar los parámetros indispensables para el mejoramiento de la eficiencia de conversión de energía. Además, se conocieron los simuladores aptos para dicho modelamiento tales como Medici, Comsol, Silvaco y Nanohub.

Palabras clave: Redes aleatorias de CNT, TCAD, Electrodo Transparente, Celdas Solares Orgánicas, COMSOL.

Grupo de investigación: Grupo de investigación en Automatización Industrial y Control (GAICO).

Investigador principal: Caterin Yojana Salas Redondo.

Director de investigación: Jose Luis Villa Ramírez.

Asesor de investigación: Alba Ávila Beltrán. Centro de Microelectrónica de la Universidad de Los Andes.

Facultad: Ingenierías.

Fecha de inicio: 1-Septiembre-2011.

**ESTUDIO INTRODUCTORIO AL MODELADO Y SIMULACIÓN DE REDES
DE NANOTUBOS DE CARBONO ALEATORIOS, COMO ELECTRODO
TRANSPARENTE PARA CELDAS SOLARES ORGÁNICAS**

SALAS REDONDO CATERIN YOJANA

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROGRAMA DE ELÉCTRICA Y ELECTRÓNICA
CARTAGENA DE INDIAS D. T. Y C.
MARZO DEL 2012**

TABLA DE CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN	9
2. MARCO TEÓRICO Y CONCEPTUAL	12
2.1 BASES CONCEPTUALES EN NANOTECNOLOGÍA.....	12
2.1.1 Nanotecnología	12
2.1.2 Nanociencia.....	12
2.1.3 Nanoescala	12
2.1.4 Nanotubos de carbono.....	12
2.1.5 Áreas de aplicación con mayor impacto de la nanotecnología	16
2.1.6 Técnicas de fabricación.....	18
2.2 BASES CONCEPTUALES EN SISTEMAS FOTOVOLTAICOS	19
2.2.1 Excitón	19
2.2.2 Difusión.....	19
2.2.3 Longitud de difusión	19
2.2.4 Partes de una celda solar	20
2.2.5 Generación de Luz y Transporte de Carga en una celda solar	20
2.2.6 Eficiencia energética de una celda solar	20
2.2.7 Diferencias entre una celda solar orgánica y una semiconductor.....	21
3. ESTADO DEL ARTE DE CELDAS SOLARES CON NANOTUBOS DE CARBONO .	22
4. ESTADO DEL ARTE DE LA SIMULACION DE CELDAS SOLARES CON NANOTUBOS DE CARBONO	36
4.1 HERRAMIENTAS DE SIMULACION	38
4.1.1 SILVACO	38
4.1.1.1 Módulos TCAD incluidos en la simulación de Celdas solares	38
4.1.1.2 Características de celdas solares simuladas	38
4.1.1.3 SILVACO-ATLAS	39
4.1.2 COMSOL MULTIPHYSICS	39
4.1.2.1 Descripción	39
4.1.2.2 Características	39
4.1.3 MEDICI	40
4.1.3.1 Utilidades del simulador	40
4.1.3.2 Características de simulación.....	41

4.1.3.3	Modulos de para aplicaciones avanzadas.....	41
4.1.3.4	Requerimientos de sistema.....	42
4.1.4	NANOHUB.....	42
4.2	AVANCES DE INVESTIGACION RELEVANTES.....	42
5.	RESULTADOS.....	55
5.1	Presentación de la propuesta a nivel Nacional.....	55
5.2	Presentación de la propuesta de investigación en eventos internacionales.....	55
5.3	Identificación de las ventajas de usar CNTs a ITO u otro material en el electrodo de la celda.	55
5.4	Relaciones interinstitucionales.....	55
5.5	Selección del modelo a reproducir.....	59
5.5.1	Hipótesis a demostrar para entender mejor la problemática desde el punto de vista de simulación, energía y control.....	59
5.5.2	Observaciones al modelar.....	59
5.5.3	Herramienta computacional seleccionada.....	60
5.6	Reproducción del modelo y simulación del electrodo transparente en una celda solar orgánica.....	60
5.6.1	Modelamiento del Electrodo Transparente.....	60
a.	Descripción del modelo.....	60
b.	Variables que Controlan la Física del Modelo.....	63
c.	Parámetros de Entrada.....	64
d.	Parámetros de salida.....	64
e.	Implementación del Modelo Numérico en Comsol.....	67
f.	Resultados de simulación.....	78
g.	Análisis.....	83
6.	CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO.....	84
7.	ANEXOS.....	85
	ANEXO 1.....	85
	ANEXO 2.....	88
	ANEXO 3.....	91
8.	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.....	94

LISTADO DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1. Áreas de aplicación con mayor impacto de la nanotecnología	16
Ilustración 2. Diagrama esquemático con el proceso de recubrimiento para depositar SWNT sobre celdas solares.....	22
Ilustración 3. Característica I–V de las DSSCs con contra-electrodos de Platino y contra-electrodos con MWCNT dopados con platino (Pt), medido a 100 mW/cm ²	23
Ilustración 4. Imagen esquemática de tres diferentes arquitecturas de contra-electrodos con nanomateriales de carbono. (a) Película de redes de CNT aleatorios. (b) Película forestal de CNT alineados y (c) Película compuesta de nanopartículas de carbono y grafito.	24
Ilustración 5. Diagrama esquemático del contra-electrodo de GN para DSSC.	25
Ilustración 6. I–V curves of DSSCs fabricated with Pt counter electrode and GN electrodes annealed at different temperatures.	26
Ilustración 7. Curva característica de la Densidad de corriente vs Voltaje de las DSSC con diferentes contra-electrodos bajo iluminación de 100 mW/cm ²	27
Ilustración 8. Voltamograma Cíclico de electrodos GNs, MWNTs, GNS40 y Pt	27
Ilustración 9. Curva de fotocorriente vs Voltaje de las DSCs basadas en grafito flexible, contra-electrodo de carbón puro, electrodos de carbón/FTO y Pt/FTO bajo irradiación de 100mW/cm ²	28
Ilustración 10. Grafica de la eficiencia contra el área activa de la celda para DSCs con contra-electrodo de carbón puro y electrodos de Pt/FTO.....	29
Ilustración 11. Esquemático de la DSSCs con contra-electrodo de CNT	29
Ilustración 12. Curva característica de I–V de las DSSC con contra-electrodo de CNT y Pt.....	30
Ilustración 13. Esquemático de una celda completa incorporando ITO-SWCNT-EDA-N3 (ITO-1-SWCNT-N3) como el electrodo de trabajo.	31
Ilustración 14. Geometría orgánica de celdas solares con red aleatoria de CNT como “back contact”.	33
Ilustración 15. Estructura de celda solar con unión PN simple con una capa delgada de red de CNT con una conductancia efectiva, utilizada para simular el transporte de carga.....	34
Ilustración 16. Imagen HRTEM de la sección transversal de los GMWNTs.	34
Ilustración 17. (a) Vista superior que muestra los componentes y la integración del contra-electrodo (más o menos a escala). (b) Sección transversal esquemática vista que muestra el flujo de corriente eléctrica en la celda (no a escala).	35
Ilustración 18. Jerarquía de las herramientas de construcción TCAD desde el nivel de procesos ha circuitos.	37
Ilustración 19. Modelamiento multi-escala de Celdas Solares	43
Ilustración 20. Nodo vs escalas (en nanómetros). Ejecución de múltiples escalas en la configuración HPC.....	44
Ilustración 21. Resultados de los cálculos para varias escalas.	45
Ilustración 22. Contraste de características entre configuraciones HPC.....	46
Ilustración 23. Sistema de modelado	48
Ilustración 24. Modelo de Celda para el estudio.....	50
Ilustración 25. Respuesta espectral ideal	50

Ilustración 26. Comportamiento ideal de la corriente de corto-circuito vs bandgap	51
Ilustración 27. Límites fundamentales	51
Ilustración 28. Diagrama de flujo para la solución numérica de las ecuaciones de la celda solar	52
Ilustración 29. Estructura de celda inicialmente simulada.....	53
Ilustración 30. Eficiencias interna y externa de la celda solar simulada.....	54
Ilustración 31. Corrientes del ánodo y cátodo de la celda solar simulada	54
Ilustración 32. Rendimiento óptico: Transmisión de luz visible de los electrodos de ITO, PEDOT y películas CNT.....	56
Ilustración 33. Poster presentado en el CPIASR International Collaboration Forum.	58
Ilustración 34. Mejores resultados de investigación de eficiencias de celdas solares.....	61
Ilustración 35. Micrografía electrónica de transmisión de las capas en una celda solar CIGS... ..	62
Ilustración 36. Selección de dominio para la capa con material ZnO:Al.....	67
Ilustración 37. Propiedades de la capa ZnO sólido policristalino	68
Ilustración 38. Ecuación general de la física TRANSFERENCIA DE CALOR EN SÓLIDOS	69
Ilustración 39. Potencial Eléctrico: Ecuaciones generales de la física ELECTRICA.....	69
Ilustración 40. Transferencia de calor en sólidos: Discretización.....	70
Ilustración 41. Transferencia de calor en sólidos: Variables dependientes.....	70
Ilustración 42. Discretización y Variables dependientes en la física ELECTRICA	70
Ilustración 43. Entradas del modelo delimitadas desde la física Transferencia de Calor en sólidos	71
Ilustración 44. Condiciones de conducción de calor y termodinámica delimitadas por la física Transferencia de Calor en sólidos.....	71
Ilustración 45. Potencial Eléctrico: Condiciones de entrada, conducción de corriente y potencial eléctrico.....	72
Ilustración 46. Potencial Eléctrico: Conducción de corriente y potencial eléctrico.....	72
Ilustración 47. Transferencia de calor en sólidos: Aislamiento térmico	73
Ilustración 48. Definición de fronteras para el Aislamiento térmico	73
Ilustración 49. Potencial eléctrico: Aislamiento eléctrico.....	74
Ilustración 50. Definición de fronteras para el Aislamiento eléctrico.....	74
Ilustración 51. Transferencia de Calor en sólidos: Superficie expuesta a la radiación ambiental	75
Ilustración 52. Definición de fronteras para la condición de exposición a la radiación ambiental	76
Ilustración 53. Potencial eléctrico: Condiciones iniciales.....	76
Ilustración 54. Definición de fronteras para la condición de aplicación de potencial eléctrico..	77
Ilustración 55. Configuración del enmallado	78
Ilustración 56. Enmallado	78
Ilustración 57. Distribución del potencial eléctrico en el electrodo.....	79
Ilustración 58. Distribución de la temperatura en el electrodo.	79

LISTADO DE TABLAS

Tabla 1. Escenarios para la investigación interdisciplinaria de nanodispositivos.....	10
Tabla 2. Técnicas de fabricación.....	18
Tabla 3. Parámetros fotovoltaicos de las DSSCs fabricadas con contra-electrodos de GN templado a diferentes temperaturas.....	25
Tabla 4. Representaciones fotovoltaicas de DSSCs con diferentes contra-electrodos	26
Tabla 5. Rendimiento fotovoltaico de las DSSC con contra-electrodo de CNT y Pt	30
Tabla 6. Propiedades fotovoltaicas de los electrodos de red de SWCNT mostrando el voltaje de circuito abierto (VOC), la densidad de corriente de cortocircuito (JSC) y el factor de relleno de celda (FF).....	31
Tabla 7. Características del electrodo compuesto por TiO ₂ - MWCNT.....	32
Tabla 8. Parámetros típicos fotovoltaicos.	35
Tabla 9. Contraste de las propiedades entre los electrodos de ITO y CNTs.....	57
Tabla 10. Parámetros de Entrada	64
Tabla 11. Parámetros de Salida.....	64
Tabla 12. Resultados experimentales de la resistencia laminar y espesor de la capa ZnO:Al	65
Tabla 13. Licencias de acceso a Comsol Multyphysics usadas en la simulación	67
Tabla 14. Propiedades principales de la capa del material ZnO:Al	68
Tabla 15. Resultados para espesor de la capa ZnO:Al con espesor de 3um	80
Tabla 16. Resultados para espesor de la capa ZnO:Al con espesor de 2um	81
Tabla 17. Resultados para espesor de la capa ZnO:Al con espesor de 0.4 um	82

1. INTRODUCCIÓN

La fabricación de las celdas fotovoltaicas inorgánicas son aquellas cuyo semiconductor es a base de material inorgánico (Si, AsGa, CuInS₂, CIS, CdTe), son poco económicas, por ende, es necesario hallar una manera de producir celdas solares sin que la inversión económica sea costosa. Debido a esta dificultad tecnológica, se ha optado por usar semiconductores orgánicos en la fabricación de las celdas. Los paneles solares orgánicos no se contemplan como un sustituto a los de silicio como material semiconductor, sino un complemento para crear mejores fuentes de energía. En este caso, se plantea el uso de los nanotubos de carbono (CNT) como material semiconductor en la fabricación de celdas fotovoltaicas orgánicas.

Los CNTs por sus propiedades (principalmente por su naturaleza orgánica), se convierten en un material de múltiples aplicaciones; en el campo de los paneles solares, han proyectado una tendencia prometedora al aumento de la eficiencia en la conversión de energía fotovoltaica a energía eléctrica en una menor área superficial del dispositivo, ya que se ha demostrado que se pueden utilizar en la capa activa de la celda, como una interfaz de colección de carga en el electrodo y como el óxido conductor transparente (ánodo de la celda) [1]. Además, los nanotubos de carbono aplicados en las películas delgadas pueden reemplazar efectivamente las capas de óxido conductor (metal) que comúnmente se usan en las celdas solares de películas delgadas poli-cristalinas.

Si se desea aplicar la nanociencia en el campo de la energía solar, se requiere de una investigación interdisciplinaria la cual agrupe los siguientes escenarios:

Tabla 1. Escenarios para la investigación interdisciplinaria de nanodispositivos.

Escenarios	Métodos usados en el área
Teoría y Modelamiento	<ul style="list-style-type: none"> - Comportamientos gobernados por fenómenos cuánticos. - Método Monte Carlo. - Teoría funcional de la Densidad (DFT). - Método de Elementos Finitos. - Clúster de ordenadores de múltiples-nodos, para simulación. - Software de simulación de nanodispositivos (Comsol, Catia, Nanohub).
Caracterización	<ul style="list-style-type: none"> - Sondas de escaneo. - Microscopios atómicos.
Fabricación de arquitecturas a nanoescala.	<ul style="list-style-type: none"> - Litografía top-down. - Auto-ensamblaje bottom-up. - Integración multiescala.

Fuente: J. Park. Nano-Solar cell Research: Forefront and Challenges. Graduate Engineering Class, ELEN 360- Nanomaterials, Winter Quarter 2009. Santa Clara University. Feb. 2009.

Durante las pasantías de investigación se abordó el primer escenario expuesto en la Tabla 1, el cual engloba el modelamiento y simulación a realizar de las celdas solares con nanotubos de carbono, para conocer el comportamiento molecular del CNT como material semiconductor de las celdas solares; dicho modelo, será la base de partida para la posterior caracterización físico-eléctrica de la celda solar y consolidar los parámetros característicos en el modelo de simulación (según [2]):

- Densidad de corriente [mA/cm^2]
- Voltaje a circuito abierto (V_{oc})
- Intensidad de corriente en cortocircuito (I_{sc})
- Factor de llenado: $ff = \frac{P_{max}}{V_{oc} * I_{sc}}$
- Resistencia (Sheet Resistance) [Ω/square]
- Área superficial específica del material de carbono [$\text{S}/\text{m}^2 \text{g}^{-1}$]
- Eficiencia de conversión de energía luminosa $\eta = \frac{P_{max}}{P_{\text{Solar incidente}}}$
- Irradiancia [W/m^2]

Teniendo en cuenta el escenario abordado en las pasantías de investigación, se plantearon los siguientes objetivos:

- 1) Realizar el estado del arte del modelamiento y simulación de electrodos de celdas solares con nanotubos de carbono.
- 2) Contrastar las herramientas de computacionales de tal manera que se conozcan el tipo de simulaciones que se pueden hacer y qué tipo de resultados se pueden obtener.
- 3) Delimitar las variables a tener en cuenta para la simulación.
- 4) Reconstruir algunas simulaciones para aplicaciones de celdas solares orgánicas con la herramienta de simulación seleccionada.

Para cumplir con los objetivos de investigación, el trabajo se dividió en las siguientes fases y cada una de ellas a su vez en sus correspondientes actividades:

Fases	Actividades
Elaboración del proyecto de Investigación	Revisión del estado del arte del modelamiento y simulación de electrodos de celdas solares con nanotubos de carbono.
Modelamiento del electrodo con redes de CNT aleatorios.	Identificar las ventajas de usar CNTs a ITO u otro material en el electrodo de la celda. Estudiar las propiedades, representadas en las ecuaciones a reproducir. Identificar variables, parámetros y significado de cada uno.
Simulación	Verificar el limite de elementos que soporta COMSOL en las simulaciones, de tal manera que se determine la cantidad de nanotubos de carbono en toda el área de la celda (verificar el área de la celda). Definir características cuantitativas del CNT como longitud, densidad, diámetro y cantidad de tubos en el electrodo.
Resultados	Obtener las curvas características de densidad del tubo vs transparencia del electrodo formado por la red aleatoria de CNTs
Validación de resultados	Validar el modelo con datos experimentales, tomados de publicaciones recientes.

2. MARCO TEÓRICO Y CONCEPTUAL

2.1 BASES CONCEPTUALES EN NANOTECNOLOGÍA

2.1.1 Nanotecnología

El prefijo “nano” proviene del griego y significa “enano”. Diseño, caracterización, producción y uso de estructuras, de dispositivos y de sistemas cuya forma y tamaño se controla a escala nanométrica (Nanoescala). Se refiere a las actividades científicas y tecnológicas llevadas a cabo a escala atómica y molecular, y a los principios científicos y a las nuevas propiedades que pueden ser comprendidos y controlados cuando se interviene a dicha escala.

2.1.2 Nanociencia

Ciencia del análisis y manipulación de materiales al nivel atómico o molecular, donde las características o propiedades de los mismos se diferencian significativamente de las presentadas a una escala mayor.

2.1.3 Nanoescala

Escala que maneja medidas mil millones de veces más pequeñas que un metro. Es decir, $1 \text{ metro} = 1 \times 10^9 \text{ nanómetros}$ y $1 \text{ milímetro} = 1.000.000 \text{ nanómetros}$

2.1.4 Nanotubos de carbono

En el año 1980, Sumio Iijima anunció que había visto el “grafito esférico,” en un trabajo de investigación relacionado con carbón. Notó que entre las varias formas de grafito había partículas de “cebolla-formadas” de cerca de 0.8 – 1 nanómetro de diámetro. Ésta cebolla -como la estructura- es de hecho el fullerene (carbon-60 o C60) descubierto en 1985 por Harold W. Kroto, Richard E. Smalley (quién falleció el 28 de octubre del 2005), y el enrollamiento de Roberto F. A la hora de ese descubrimiento, este hecho fue

pasado por alto. A partir de 1987, cuando comenzó -Sumio Iijima- a trabajar en los laboratorios de investigación básica de NEC, decidió estudiar de nuevo estas “cebollas” para reconfirmar la investigación que había conducido cinco años antes. Luego para la síntesis usó un método anunciado en 1990, el cual genera el C60 usando descarga a partir de dos barras del electrodo de carbón (el método de la descarga del arco). Dentro del hollín que se acumuló sobre el poste negativo del carbón, sin embargo, encontró un material, en forma de aguja, que nunca había sido considerado antes. A este material en forma de aguja, Sumio Iijima le dio el nombre de “nanotubo de carbón” en 1991.

Los nanotubos de carbono son unas nanoestructuras compuestas por 60 átomos de carbono. Estas nanoestructuras pueden estar formadas por una capa de grafito (Single Wall Nanotube “SWNT”), con un grosor de 1 solo átomo de carbono¹ dos capas (Double Wall Nanotube “DWNT” [3]) o varias láminas (Multiple Wall Nanotube “MWNT”) de grafito enrolladas en sí mismas. Los nanotubos también son conocidos con los nombres "Buckyball o Fullerenos", gracias al ingeniero y arquitecto Buckminster Fuller, quién trabajó en la creación de cúpulas geodésicas que precisamente es la forma geométrica del fullereno -icosaedro- (como un balón de fútbol con 20 caras de triángulos equiláteros iguales). Son las fibras de carbono mas fuertes que se conocen, y poseen propiedades muy interesantes: Resistencia a la tracción de 45 mil millones de pascuales, conducen el calor a la manera casi del diamante o al zafiro (6,000 vatios por metro por kelvin), una capacidad de transporte de corriente estimada en mil millones de amperes por centímetro cuadrado, a temperatura ambiente y una estabilidad térmica de 2800 grados Celsius en el vacío, y 750 °C en aire. En 1998, durante el Japón Science, con el proyecto de investigación cooperativo internacional de Technology Corporation (JST) “Nanotubulites,” Sumio Iijima descubrió el grafito “*single-layer*” formado como un tubo con un extremo cerrado, que más adelante fue conocido como “*Nanohorn*”. [4].

Son obtenidos y caracterizados por cuatro métodos: El primero es el llamado “*Método de descarga por arco eléctrico*” [5], el cual permite fabricar cantidades macroscópicas de nanotubos, consiste en conectar dos barras de grafito a una fuente de alimentación estas son separadas unos milímetros y luego se acciona un interruptor. Al saltar una

¹ A esta lamina se denomina Graphene; se considera que sustituirá hacia el 2025 al silicio en la fabricación de transistores.

chispa de 100 amperes de intensidad entre las barras, el carbono se evapora en un plasma caliente. Parte del mismo se vuelve a condensar en forma de nanotubos. Este método fue desarrollado y publicado en 1992, por Thomas Ebbeser y Pullickel M. Ajayan, del laboratorio de investigación básica de NEC.

El segundo método es el de “*Vapodeposición química catalítica (Catalytic Chemical Vapor Deposition, CVD)*” [6] introducido por Morinubo Endo, de la Universidad de Shinshu en Nagano (Japón). En este método, se coloca un sustrato en un horno, se calienta a 600°C y lentamente se añaden metano y gas, que liberan átomos de carbono, que se pueden recombinar en forma de nanotubos. Permite la síntesis controlada, es decir, número de paredes, longitud y estructura microscópica de SWNTs, DWNTs y MWNTs con pureza de hasta el 98 %. Este método requiere un sustrato ó soporte adecuado (Si, SiO₂ (Cuarzo), Al₂O₃, MgO), generalmente impregnado del catalizador sobre el que se produce el crecimiento de los CNTs. Adicional a esto, las impurezas que intervienen en el proceso usualmente son: Metales y óxidos inorgánicos, procedentes del catalizador, y Carbono Amorfo.

El tercer método se conoce como “*Ablación Laser*” o “*Arco de descarga eléctrica*” [7] (método por el cual Sumio Iijima sintetizó nanotubos de carbono por primera vez), en éste, “sintetizan fulleritas (moléculas de fullereno) con pulsos de láser en lugar de electricidad y en presencia de un catalizador como hierro, itrio, cobalto y níquel, para generar el gas caliente de carbono a partir del que se forman los nanotubos. Según los resultados de la investigación realizada por un grupo de investigadores de la universidad nacional de Colombia, la fullerita producida en presencia de hierro contiene pocos nanotubos pero es el catalizador que mayor rendimiento presenta en la producción de nanotubos de pocas capas (muchos de aproximadamente 13 nm).”

El cuarto y último método se conoce como “*Método del Catalizador Flotante (‘Floating catalyst method’)*” [8] fue desarrollado en la década de 1980 para la producción de VGCF². Hoy en día, es una forma válida de la obtención de nanotubos,

² VGCF-H® Es un vapor de fibra de carbón diseñada expresamente a las propiedades eléctricas y térmicas de materiales de alto rendimiento. Es un producto de Show Denko KK, Tokio, Japón.

nanofibras o VGCF, aunque el control de lo que ocurre es bastante más complicado que en el método del CVD. Produce de forma continua, en un único proceso continuo, los nanofilamentos catalíticos, introduciendo en el reactor sus reactivos. Por lo tanto, todas las etapas descritas en el método del CVD (preparación del catalizador, generación de nanopartículas de metal elemental, crecimiento de nanofilamentos y engrosamiento debe tener lugar en un único reactor.

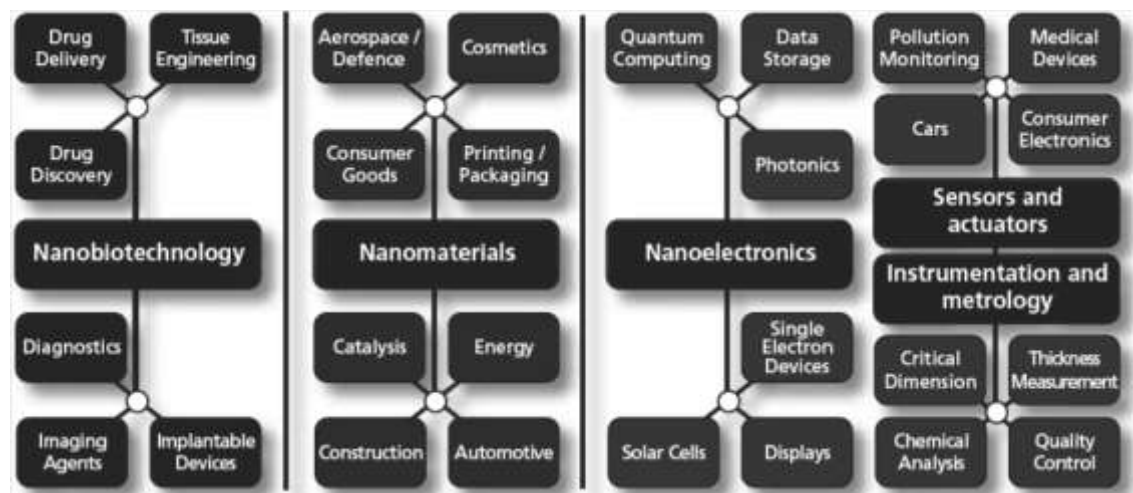
Cabe añadir dentro de los métodos mencionados anteriormente, el titulado: “Nuevo sistema multitubular para la síntesis de nanotubos de carbono en fase gas”, patentado con N°P200401633, a nombre de la UNED (Universidad Nacional de Educación a Distancia) y del CSIC. Inventores: D. Antonio Guerrero, D^a. Vicenta Muñoz, D^a. Daniela Martín, D^a. Patricia Sampedro y D^a. Inmaculada Rodríguez. Con una capacidad de obtener 40 kg de nanotubos de carbono por día.

En éstos métodos se encuentran ventajas y limitaciones que permiten seleccionar la mejor manera de sintetizar nanotubos. El primer método definido, las altas temperaturas y los catalizadores metálicos añadidos a las barras pueden producir nanotubos de pared única y múltiple con pocos defectos estructurales, pero los tubos tienden a ser cortos (50 micras o menos) y depositarse en formas y tamaños aleatorios. El CVD es la técnica más sencilla de los tres métodos para su aplicación a escala industrial. Podría emplearse para fabricar nanotubos largos, necesarios en las fibras empleadas en materiales compuestos; sin embargo los nanotubos producidos suelen ser de pared múltiple y a veces están plagados de defectos (Por ejemplo, los tubos tienen sólo una décima de la resistencia a la tracción respecto a los fabricados por la descarga de arco). Por último, con el de Ablación Laser, se producen nanotubos de pared única presenta mejores condiciones en las propiedades inertes del nanotubo que los multicapa) con una gama de diámetros que se pueden controlar variando la temperatura de reacción; éste método necesita láseres muy costosos

2.1.5 Áreas de aplicación con mayor impacto de la nanotecnología

La nanotecnología es aplicable a cualquier área de la tecnología, para dar solución a problemas que a diario se presentan en la sociedad, pero las de mayor impacto y con mayor tendencia de desarrollo, son mapeadas en la Ilustración 1.

Ilustración 1. Áreas de aplicación con mayor impacto de la nanotecnología



Fuente: Mar Pérez. La nanotecnología en el mundo de la empresa. Phantoms Foundation. 2010.

El presente estudio está ubicado en el marco de las Celdas Solares (Solar Cells) en el área de Nanoelectrónica (Nanoelectronics).

Los avances de investigación en el uso de nanomateriales orgánicos en la fabricación de las celdas solares, son promisorios. A continuación se listan los más relevantes para el caso de estudio:

- Recubrimiento de nanotubos de carbono (de única y doble capa) con nanomateriales orgánicos para obtener propiedades de transporte eléctrico decisivas tal como alta conductividad eléctrica o potencia termoeléctrica, para aplicaciones de conversión de energía termoeléctrica [9].

- Al recubrir andamios de nanotubos de carbono multicapas³ con puntos cuánticos de Oxido de Zinc (ZnO) que trabajan como foto sensibilizador en vez de ser el medio de transporte de los electrones (como se usa en las convencionales celdas solares de este tipo), se presenta un incremento de la absorción UV y una disminución de emisión en la gama visible, en torno a 560 nm, mientras que sólo los puntos cuánticos de ZnO muestran una fuerte emisión visible [10].
- Fabricación de películas delgadas semitransparentes de nanotubos de carbono depositados en un tipo adecuado de sustrato de silicio, crean una alta densidad en las uniones p-n en la interfaz. La alta relación de aspecto y la gran superficie de estos nanomateriales de carbono, pueden beneficiar a la disociación del excitón (par hueco-electrón) y el transporte de portadores de carga, mejorando así la eficiencia de conversión de energía en celdas solares [11]. Además, como electrodo transparente, los nanotubos de carbono han demostrado que reducen los reflejos en la superficie a menos de 1%, lo que ayuda significativamente en la captación de luz para la energía fotovoltaica [12].
- Se ha demostrado que los CNT multicapas con un diámetro largo (100 nm) pueden ser usados como contra-electrodo en las celdas solares sensibilizadas por colorante (Dye Sensitized Solar Cell “DSSC”), mostrando una mejor reacción redox y una eficiencia de conversión de energía del 3% [13]. Asimismo, se ha empleado al nanotubo de carbono multicapa recubierto de platino, para usarlo como capa catalítica en el contra electrodo, obteniendo una eficiencia de 6,5% en las DSSC [14].

Por otra parte, los desarrollos del área en Colombia, más significativos para la investigación son los siguientes:

- En la Universidad del Valle (Colombia), apuestan al desarrollo de electrodos, donde se prepararán membranas basadas en compuestos de nanotubos de carbón (CNT) y

³ Los andamios de nanotubos de carbono multicapas, son estructuras de nanotubos de carbono multicapas, con auto-apoyo (es decir, se sirve de soporte así mismo) y de gran área superficial.

óxido metálico (por ejemplo SnO₂), para cargar uniformemente una mono capa de nanopartículas del óxido metálico sobre la superficie de los CNTs [15].

- El grupo de investigación de *Materiales Nanoestructurados y sus Aplicaciones*, de la Universidad Nacional (Sede Bogotá), dirigido por el profesor Anderson Dussan, han desarrollado proyectos interesantes cuyos resultados son relevantes para la investigación. Estos son: Producción y caracterización de silicio poroso (material nanoestructurado con fotoluminiscencia eficiente en el espectro visible a temperatura ambiente [16]) aplicando técnicas foto-térmicas, la síntesis y estudio de las propiedades estructurales y de estructura electrónica del compuesto Cu₃BiS₃⁴ [17] para ser usado como capa absorbente en la fabricación de celdas solares y finalmente, la caracterización eléctrica y estructural de películas delgadas de SnS⁵ [18], [19]

2.1.6 Técnicas de fabricación

Las técnicas de fabricación de productos nanotecnológicos se agrupan en dos grandes tipos: Bottom-Up (fabricación de lo pequeño a lo grande) y Top-Down (fabricación de lo grande a lo pequeño). La clasificación y ejemplos de cada tipo expuesto anteriormente se tabulan en la tabla 2.

Tabla 2. Técnicas de fabricación

Tipo	Técnica	Ejemplos de productos fabricados con esta técnica
Bottom-Up	Síntesis química	Cosméticos, Aditivos.
	Auto-Ensamblaje	Cristales, films, pantallas.
	Ensamblaje posicional	Dispositivos atómicos o moleculares, SPM, pinzas ópticas.
Top-Down	Litografía	Dispositivos electrónicos, Chips, Quantum lasers, chips de ordenador MEMS
	Tallado, Grabado, Molido	Superficies de precisión, espejos ópticos de alta calidad.

⁴ El Cu₃BiS₃ (vittihenita) es un semiconductor tipo p que pertenece al grupo I-VVII. Presenta una buena estabilidad térmica, por encima de la temperatura ambiente, que lo hacen un buen candidato a ser utilizado en la fabricación de celdas solares tipo heterojuntura.

⁵ Sulfuro de Estaño (SnS) es un material semiconductor que exhibe conductividad tipo p, pero puede cambiar de conductividad p a conductividad n, como consecuencia de esto, el SnS puede ser usado en la fabricación de homojunturas p-n. Es atractivo en aplicaciones como foto-electrodo de celdas solares electroquímicas.

2.2 BASES CONCEPTUALES EN SISTEMAS FOTOVOLTAICOS

2.2.1 Excitón

Es una partícula que resulta de la superposición de un electrón y un hueco. Esta unión resulta por la fuerte interacción entre las cargas opuestas. Es prácticamente neutra. En celdas solares, la generación de excitones, es el primer paso (eléctricamente hablando) para obtener la foto-corriente al final del proceso de interacción de cargas entre los materiales con que se fabricó la celda. [20]

2.2.2 Difusión

Es la propagación de partículas a través del movimiento aleatorio de las regiones de mayor concentración a regiones de menor concentración. En nuestro caso, la partícula que debe difundirse es el excitón antes de ser separados (disociados) en cargas libres (hueco, electrón), como es necesaria una alta fuente eléctrica, debe propagarse a una región de materiales heteroestructurados de la celda, ya que poseen esta característica. [21]

2.2.3 Longitud de difusión

Es el promedio de la distancia por un portador minoritario en un semiconductor, desde el punto en el que se ha formado hasta el momento en que se absorbe. Este parámetro es fundamental para el transporte de partículas en una región, en nuestro caso, se calcula la longitud de difusión del excitón. Para una suficiente absorción de luz, La longitud de difusión del excitón debe ser aproximadamente igual al espesor de la capa activa de la celda. [22]

2.2.4 Partes de una celda solar

La estructura básica consta de Contactos/Electrodos (ánodo, cátodo), Unión simple o heterounión PN. En el orden estructural de superior a inferior y de manera general, las celdas solares se definan por las siguientes capas [23]:

- a) Capa protectora: Encapsulado, substrato, material transparente p.e. vidrio
- b) Capa conductiva: Sirve como colector de electrones. (Electrodo)
- c) Capa antirreflectora: Guía a los fotones en la celda solar, sin esta capa, la mayor parte de la luz incidente, se refleja en la superficie.
- d) Capa de transporte de carga: Compuesta por el material tipo n y tipo p (capa activa), aquí ocurre la generación y transporte de cargas portadoras.
- e) Capa Posterior: Contra electrodo. Actúa como conductor.

2.2.5 Generación de Luz y Transporte de Carga en una celda solar

El proceso de conversión de energía fotovoltaica a energía eléctrica, se puede resumir así [23]: La luz incide en el electrodo superior y los fotones con energía mayor a la de gap del semiconductor son absorbidos y esta energía se usa para excitar electrones para que salten de la banda de valencia a la de conducción generando excitones que quedan libres para luego ser transportados por mecanismos de difusión. Luego son separados y arrastrados hasta la juntura, donde pasan a ser portadores de carga que son extraídos a través de los contactos (electrodos). El transporte de carga en la celda inicialmente es debido a los procesos de difusión (siendo par hueco-electrón), pero luego son separados y literalmente arrastrados hacia la juntura por el campo eléctrico.

2.2.6 Eficiencia energética de una celda solar

La eficiencia de una celda solar es la cantidad de luz solar (fotones) que es convertida en electricidad (foto-corriente), medida como la fracción de la potencia generada por la celda entre la potencia que proporciona la fuente luminosa (se obtiene del calculo de la

irradiancia[W/m^2] y el área superficial de la celda[m^2]) en porcentaje (%) [23]. Cabe anotar, que a escala nano, se tiene en cuenta la EFICIENCIA CUANTICA INTERNA de la celda la cual se entiende como la relación entre la colección de cargas portadoras por cada fotón que incide en la celda, por lo tanto, también se hace referencia a la respuesta espectral de la celda de acuerdo a las longitudes de onda del espectro de luz que incide en la celda.

En las celdas solares orgánicas, la meta es igualar o superar a las eficiencias obtenidas con las celdas solares convencionales y así competir comercialmente con las inorgánicas. La máxima eficiencia obtenida en el mercado es de 40% (con materiales inorgánicos) en comparación con las celdas solares orgánicas, donde el máximo obtenido no supera el 10% (DSSC con 9,9% de eficiencia)

2.2.7 Diferencias entre una celda solar orgánica y una semiconductor

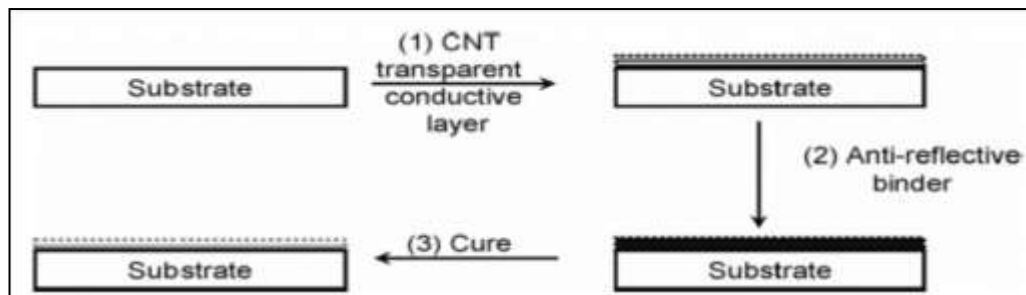
La diferencia esta en las propiedades que aportan los materiales. La celda solar a pesar que sea orgánica o inorgánica los materiales son semiconductores, pero cuando la celda es orgánica, el material orgánico aporta mas transparencia y flexibilidad en el dispositivo, aportando mayor absorción de luz y facilidad-economía de fabricación respectivamente. Dentro de los materiales orgánicos, se selecciona el CNT ya que este a pesar de ser orgánico, al formar redes (laminas) posee baja resistencia, mayor área superficial. A pesar que las eficiencias logradas hasta el momento con celdas solares de materiales orgánicos son menores que los inorgánicos, se prevé que el avance en eficiencia sea cada vez mayor y la relación costo producción/eficiencia será mayor que con celdas de materiales inorgánicos.

3. ESTADO DEL ARTE DE CELDAS SOLARES CON NANOTUBOS DE CARBONO

En esta sección se presentan los avances de investigación relacionados al modelado abordado en las pasantías de investigación.

Las películas delgadas de SWNT usados como electrodo transparente reducen los reflejos en la superficie de 332nm a 1%, lo que ayuda en la captación de luz para la energía fotovoltaica, obteniendo una eficiencia de conversión de energía que oscila entre 1% - 2,5%. La ilustración 2 figura el esquema del proceso de recubrimiento para depositar los SWNT sobre celdas solares propuesto en [24]

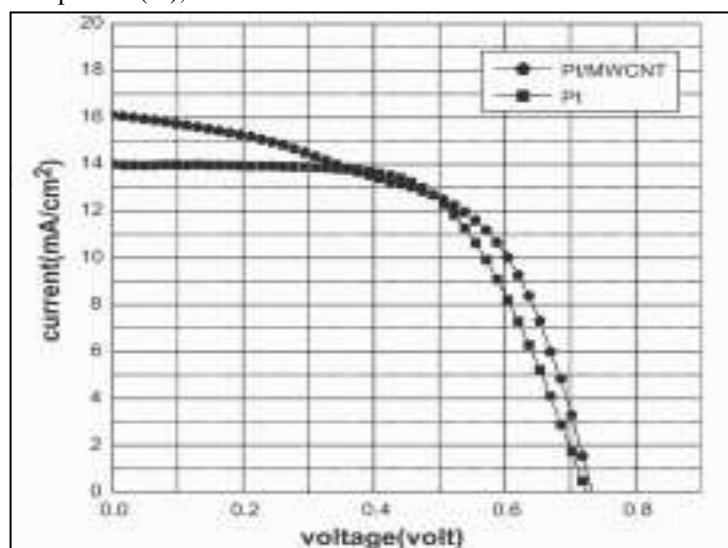
Ilustración 2. Diagrama esquemático con el proceso de recubrimiento para depositar SWNT sobre celdas solares



P. Glatkowski, E. Turevskaya, D. Britz, D. Rich, M. DiCologero, T. Kelliher, J. Sennott, D. Landis, R. Braden, P. Mack, J. Piche. 2009. Carbon nanotube transparent electrodes: A case for photovoltaics. 34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), (p. 001302 - 001305). Philadelphia

Los MWCNT recubiertos de platino y usados como capa catalítica en el contra-electrodo transparente en las DSSC [25] generan una eficiencia de 6,5%. En la Ilustración 3 se observa que el contra-electrodo, muestra relativamente mejor rendimiento con MWCNT dopados con platino (Pt).

Ilustración 3. Característica I-V de las DSSCs con contra-electrodos de Platino y contra-electrodos con MWCNT dopados con platino (Pt), medido a 100 mW/cm².



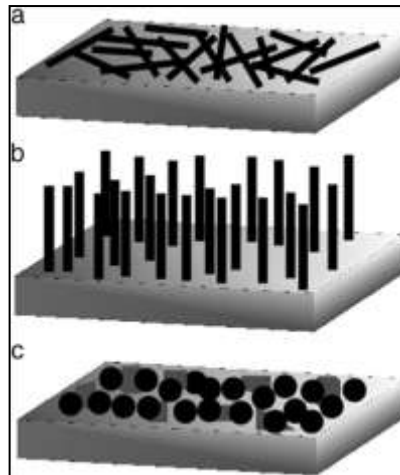
A. Mathew, G. Mohan & N. Munichandraiah. Dye Sensitized Solar Cell Based on Platinum Decorated Multiwall Carbon Nanotubes as Catalytic Layer on the Counter Electrode. *Materials Research Bulletin*. Oct. 2011. Vol. 46, Issue 10, p. 1535-1754.

En [26] se usaron tres tipos de películas de CNTs donde las películas de redes aleatorias de SWCNT sobre vidrio, mostraron un rendimiento razonable a la resistencia serie similar en comparación con flúor platinado de estaño dopado con revestimiento de óxidos de vidrio, las películas forestales de MWCNT alineados sobre acero Inconel y cuarzo tubo una actividad catalítica similar a la mencionada anteriormente, pero el rendimiento electroquímico de las películas se vio limitada por su alta porosidad y finalmente, las películas compuestas de nanopartículas de carbón presionadas sobre plástico de óxido-polietileno tereftalato de indio y estaño presentó la tasa mínima de transferencia de la resistencia como resultado de una combinación de alta actividad catalítica y empaquetamiento denso de la materia. En la ilustración 4 se observan los tres tipos de películas mencionadas.

En esta investigación se usó espectroscopía de impedancia electroquímica y microscopía electrónica para analizar propiedades como la actividad catalítica, conductividad, espesor, transparencia y flexibilidad de las películas de contra-electrodos.

Como resultado se obtuvo eficiencias similares a las celdas convencionales que usan contra-electrodos de Platino (Pt), al usar contra-electrodos hechos con películas de redes de SWCNT aleatorios

Ilustración 4. Imagen esquemática de tres diferentes arquitecturas de contra-electrodos con nanomateriales de carbono. (a) Película de redes de CNT aleatorios. (b) Película forestal de CNT alineados y (c) Película compuesta de nanopartículas de carbono y grafito.



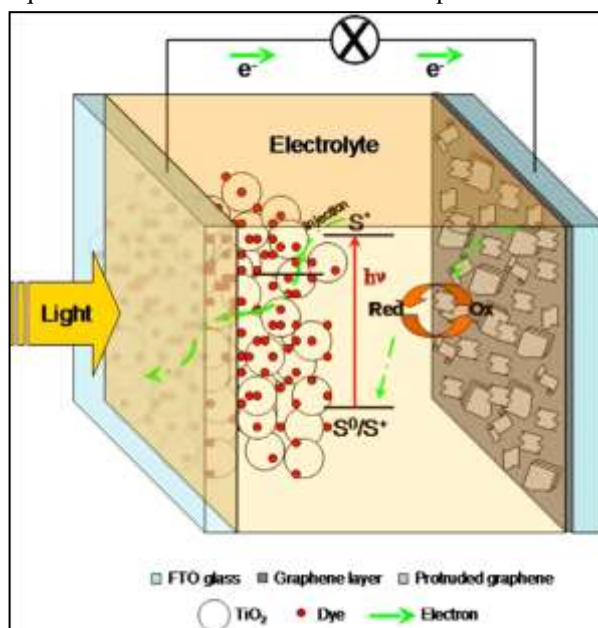
K. Aitola, J. Halme, N. Halonen, A. Kaskela, M. Toivola, A. Nasibulina, K. Kordás, G. Tóth, E. Kauppinena, & P. Lunda. Comparison of dye solar cell counter electrodes based on different carbon nanostructures. *Thin Solid Films*. 2011, Vol. 519, p. 8125-8134.

Por otro lado, en [27] las nanolaminas de grafeno (GNs) usadas como sustituto del Pt en los contra-electrodos de las DSSC presentaron los siguientes resultados:

- La temperatura de hibridación de materiales GNs juega un papel importante en la calidad del contra-electrodo de este material y el rendimiento fotovoltaico de la DSSC resultante.
- Para análisis se usó microscopía electrónica de barrido de emisión de campo, espectroscopía raman y espectroscopia de impedancia electroquímica.
- Una eficiencia de conversión de energía hasta de un 6.81%.

En la Ilustración 5 se muestra el diagrama esquemático del contra-electrodo en mención.

Ilustración 5. Diagrama esquemático del contra-electrodo de GN para DSSC.



D.W. Zhang, X.D. Li, H.B. Li, S. Chen, Z. Sun, X.J. Yin & S.M. Huang. Graphene-based counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2011. Vol. 49, Issue 13. P. 4610 – 4613. ISSN 0008-6223.

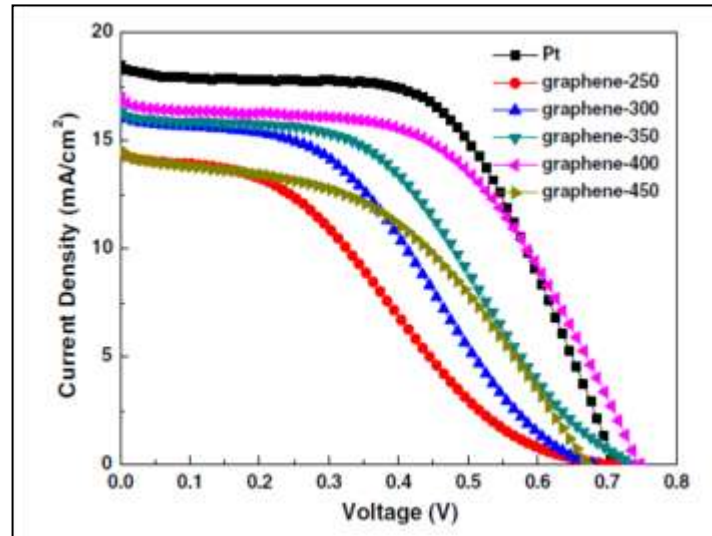
Los resultados de dicha investigación se encuentran agrupados en la Tabla 3 y graficados en la Ilustración 6.

Tabla 3. Parámetros fotovoltaicos de las DSSCs fabricadas con contra-electrodos de GN templado a diferentes temperaturas.

Counter-electrode	R_{ct} ($\Omega \text{ cm}^2$)	J_{sc} (mA cm^{-2})	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
Platinum	0.76	18.507	0.714	57.51	7.59
GNs-250 °C	337.18	14.478	0.697	32.56	3.29
GNs-300 °C	274.19	16.147	0.680	40.43	4.44
GNs-350 °C	3.01	16.358	0.742	44.34	5.38
GNs-400 °C	1.20	16.988	0.747	53.62	6.81
GNs-450 °C	16.40	14.525	0.672	45.74	4.46

D.W. Zhang, X.D. Li, H.B. Li, S. Chen, Z. Sun, X.J. Yin & S.M. Huang. Graphene-based counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2011. Vol. 49, Issue 13. P. 4610 – 4613. ISSN 0008-6223.

Ilustración 6. I–V curves of DSSCs fabricated with Pt counter electrode and GN electrodes annealed at different temperatures.



D.W. Zhang, X.D. Li, H.B. Li, S. Chen, Z. Sun, X.J. Yin & S.M. Huang. Graphene-based counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2011. Vol. 49, Issue 13. P. 4610 – 4613. ISSN 0008-6223.

En [28] se fabricó un contra-electrodo compuesto por 60% de MWCNTs y 40% de GNs para DSSC. Los resultados más relevantes son los siguientes:

- Rendimiento fotovoltaico fue fuertemente influenciado por la concentración de GNs en el contra-electrodo compuesto.
- Eficiencia del 4% cuando la DSSCs trabaja en su máxima potencia.

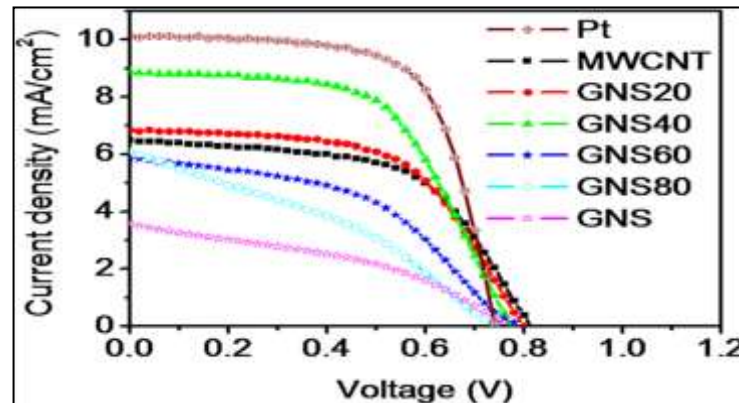
Los resultados están agrupados en la Tabla 4 y en las Ilustraciones 7 y 8.

Tabla 4. Representaciones fotovoltaicas de DSSCs con diferentes contra-electrodos

Samples	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF	Eff (%)
MWNT	6.4	0.81	0.57	3.0
GNS20	6.8	0.80	0.57	3.2
GNS40	8.8	0.77	0.58	4.0
GNS60	5.8	0.79	0.47	2.1
GNS80	6.1	0.75	0.34	1.6
GNS	3.6	0.77	0.39	1.0
Pt	10.0	0.74	0.67	5.0

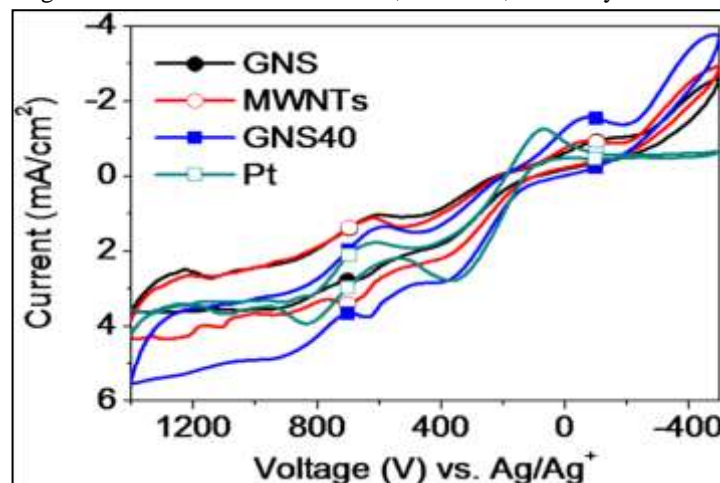
T. Battumur, S. Mujawar, Q.T. Truong, S. Ambade, D. Lee, W. Lee, S.H. Han & S.H. Lee. Graphene/carbon nanotubes composites as a counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Current Applied Physics*. 2011, ISSN 1567-1739.

Ilustración 7. Curva característica de la Densidad de corriente vs Voltaje de las DSSC con diferentes contra-electrodos bajo iluminación de 100 mW/cm²



T. Battumur, S. Mujawar, Q.T. Truong, S. Ambade, D. Lee, W. Lee, S.H. Han & S.H. Lee.
Graphene/carbon nanotubes composites as a counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Current Applied Physics*. 2011, ISSN 1567-1739.

Ilustración 8. Voltamograma Cíclico de electrodos GNs, MWNTs, GNS40 y Pt



T. Battumur, S. Mujawar, Q.T. Truong, S. Ambade, D. Lee, W. Lee, S.H. Han & S.H. Lee.
Graphene/carbon nanotubes composites as a counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Current Applied Physics*. 2011, ISSN 1567-1739.

Por otro lado, si se fabrica un electrodo semitransparente con diferentes cantidades de SWCNTs rociados sobre sustratos de silicio amorfo en las celdas solares de Barrera Schottky, se obtienen los siguientes resultados, según lo expuesto en [29]:

- La eficiencia cuántica externa medida mostró un comportamiento espectral en función de la transparencia óptica en la red de SWCNT, presentando un máximo de hasta 35% en una longitud de onda de 460 nm.

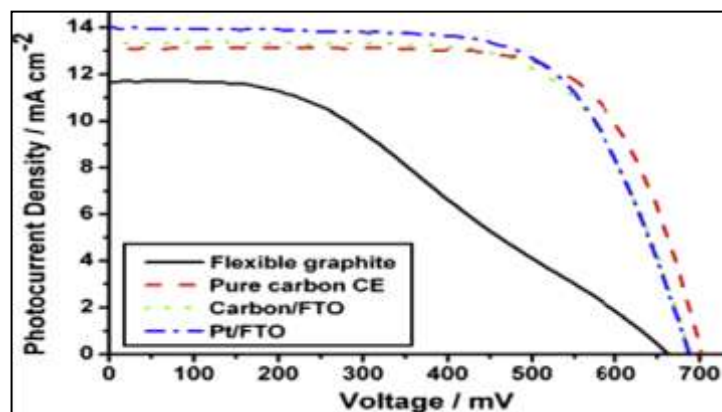
- Las simulaciones numéricas mostraron una baja eficiencia en los contactos de SWCNT en la recolección de los agujeros.

Además, se puede usar el carbono puro usado en el contra-electrodo de las DSSC con las siguientes características, según en [30], obteniendo como resultado una eficiencia de conversión de energía, con valores del 6,46% y 5%, para electrodos con áreas de 0,15 y 1 cm² respectivamente, lo cual se refleja en la Ilustración 10.

- Lamina de grafito flexible industrial como sustrato (con un grosor de 0.2 mm y una densidad de área de 0.03 g/cm²) y carbón activado como material catalítico.
- Resistencia serie (R_s) y resistencia de transferencia de carga muy bajas (R_{ct}) gracias a la combinación de la alta conductividad del grafito flexible con la alta propiedad catalizadora del carbón activado.

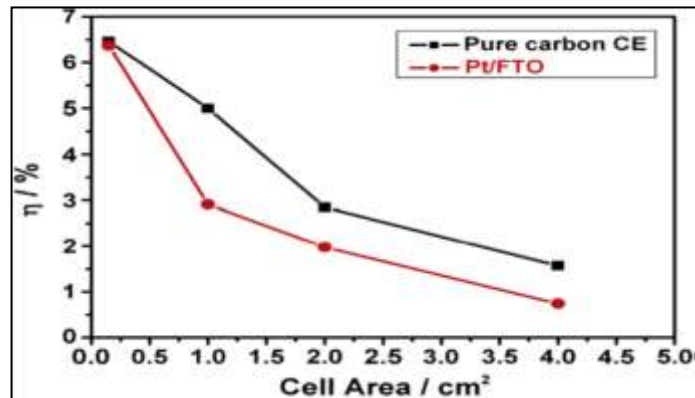
En la Ilustración 9 se observan las diferentes curvas características de densidad de corriente de las DSCs basadas en grafito flexible, con contra-electrodo de carbón puro, con electrodos de carbón/FTO y con electrodos de Pt/FTO.

Ilustración 9. Curva de fotocorriente vs Voltaje de las DSCs basadas en grafito flexible, contra-electrodo de carbón puro, electrodos de carbón/FTO y Pt/FTO bajo irradiación de 100mW/cm²



C. Jikun, L. Kexin, L. Yanhong, G. Xiaozhi, L. Dongmei, D. Minghui, H. Shuqing, M. Qingbo. A flexible carbon counter electrode for dye-sensitized solar cells. Carbon. 2009. Vol. 47. P. 2704 – 2708.

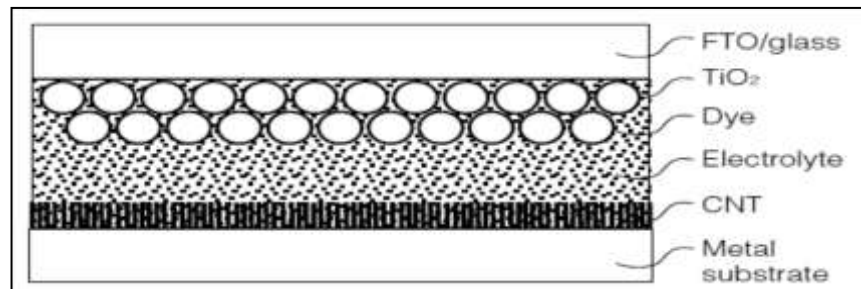
Ilustración 10. Grafica de la eficiencia contra el área activa de la celda para DSCs con contra-electrodo de carbón puro y electrodos de Pt/FTO.



C. Jikun, L. Kexin, L. Yanhong, G. Xiaozhi, L. Dongmei, D. Minghui, H. Shuqing, M. Qingbo. A flexible carbon counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2009. Vol. 47. P. 2704 – 2708.

En [31], se usaron a los CNTs cultivados sobre un sustrato de metal (usando la técnica MPCVD - Microwave Plasma Enhanced Chemical), como contra-electrodo en las DSSCs. En la Ilustración 11 se observa el esquema del modelo de la celda.

Ilustración 11. Esquemático de la DSSCs con contra-electrodo de CNT



O. Topon, D. Matsumoto & M. Inaguma. Carbon Nanotubes Counter Electrode for Dye-Sensitized Solar Cell. *Fujikura Technical Review*. 2011. P. 47 – 50.

Las propiedades electroquímicas del contra-electrodo fueron caracterizadas por la voltametría cíclica y la medición de la impedancia. Los resultados obtenidos fueron:

- Mostraron una alta densidad de corriente, se debe controlar tanto el diámetro como el volumen del CNT, para obtener mejores resultados en esta propiedad.
- Tienen baja reducción de potencial y una impedancia de transporte de carga de reacción redox I-/I3- menor que la de los Pt, o sea, tienen mayor velocidad de reacción de reducción

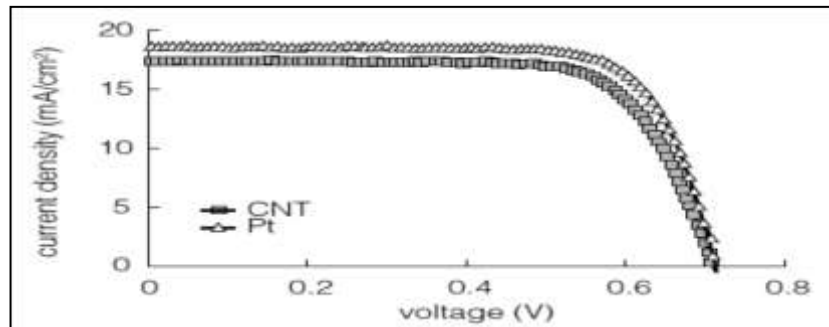
- El contra-electrodo con CNT alcanzó una eficiencia del 9%. En la Tabla 5, se contrastan las características del contra-electrodo fabricado con Pt y con CNT, al igual que en la Ilustración 12.

Tabla 5. Rendimiento fotovoltaico de las DSSC con contra-electrodo de CNT y Pt

Counter electrode	J_{sc} (mA/cm ²)	I_{sc} (mA)	V_{oc} (V)	FF	η (%)
Pt	18.67	4.67	0.713	0.747	9.95
CNT	17.39	4.35	0.711	0.727	8.99

O. Topon, D. Matsumoto & M. Inaguma. Carbon Nanotubes Counter Electrode for Dye-Sensitized Solar Cell. *Fujikura Technical Review*. 2011. P. 47 – 50.

Ilustración 12. Curva característica de I-V de las DSSC con contra-electrodo de CNT y Pt.



O. Topon, D. Matsumoto & M. Inaguma. Carbon Nanotubes Counter Electrode for Dye-Sensitized Solar Cell. *Fujikura Technical Review*. 2011. P. 47 – 50.

Otra opción de contra-electrodos para DSSC es expuesta en [32], donde los contra-electrodos son fabricados con nueve materiales diferentes:

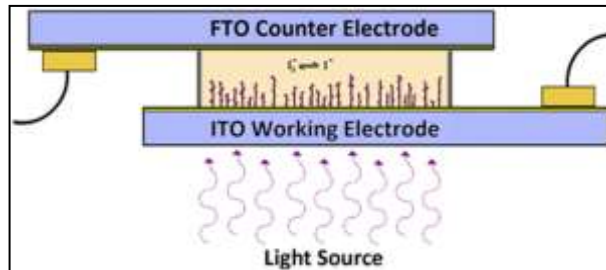
Carbono mesoporoso sintetizado (Com), carbón activado (Ca), carbón negro o puro (Cb), carbón conductor (CC), carbono colorante (Cd), fibra de carbono (Cf), nanotubos de carbono (Cn), tóner de una impresora desechado (Cp) y fullerenos (C60).

El análisis se hizo mediante la medición de voltametría cíclica (CV), espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) y la curva de polarización- Tafel. Al comparar la actividad electroquímica catalítica con los contra-electrodos de Pt se obtuvo:

- El contra-electrodo de Com mostró la mejor actividad electroquímica catalítica, comparable con el rendimiento de los electrodos de Pt.
- Eficiencia de conversión de energía que oscila entre 2.8 - 7.5%

El vidrio recubierto por redes de enlace covalente de "SWNT" sobre ITO, se uso como electrodos para DSSC en [33] tal como se muestra en la Ilustración 13.

Ilustración 13. Esquemático de una celda completa incorporando ITO-SWCNT-EDA-N3 (ITO-1-SWCNT-N3) como el electrodo de trabajo.



D. Tune, B. Flavel, J. Quinton, A. Ellis, J. Shapter. Single walled carbon nanotube network electrodes for dye solar cells. *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 2010. Vol 94. P 1665–1672.

El análisis de resultados, se obtuvo a través de la microscopia de escaneo electrónico, de fuerza atómica, raman y espectroscopia UV-Visible donde se dedujo:

- Aumento significativo de la densidad de corriente gracias a por la acumulación de capas secuenciales de CNTs entrecruzado con etilendiamina para formar una red 3D de SWCNT sensibilizado con colorante.
- Electrodo no sensibilizados fabricados con redes de SWCNT sobre ITO son fotoactivos por si mismos, con evidencia espectral mostrando absorbencia al exterior que abarca la región visible.

Los resultados están agrupados en la Tabla 6.

Tabla 6. Propiedades fotovoltaicas de los electrodos de red de SWCNT mostrando el voltaje de circuito abierto (VOC), la densidad de corriente de cortocircuito (JSC) y el factor de relleno de celda (FF).

Cell	V_{OC} (mV)	J_{SC} ($\mu A/cm^2$)	FF
ITO-1-SWCNT	47	2.0	0.28
ITO-2-SWCNT	46	3.3	0.30
ITO-3-SWCNT	44	4.2	0.32
ITO-4-SWCNT	43	4.5	0.31
ITO-5-SWCNT	43	4.9	0.31
ITO-1-SWCNT-N3	43	2.8	0.28
ITO-2-SWCNT-N3	41	3.9	0.27
ITO-3-SWCNT-N3	41	4.8	0.29
ITO-4-SWCNT-N3	39	5.3	0.32
ITO-5-SWCNT-N3	36	6.2	0.29

D. Tune, B. Flavel, J. Quinton, A. Ellis, J. Shapter. Single walled carbon nanotube network electrodes for dye solar cells. *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 2010. Vol 94. P 1665–1672.

Al depositar SWCNT en sustratos de láminas de acero inoxidable y usar este material compuesto como contra-electrodo para DSSCs basadas en Rutenio, en [34] obtuvieron los siguientes resultados:

- Alta densidad de corriente de corto circuito: $J_{sc} = 9.21 \text{ mA/cm}^2$
- Buen voltaje de circuito abierto $V_{oc} = 0.660 \text{ V}$
- Eficiencia de conversión de energía de 3.92%

Dichos resultados son comparables con los obtenidos con un contra-electrodo de Pt donde la película tiene un espesor de $2 \mu\text{m}$:

- Densidad de corriente de corto circuito: $J_{sc} 10.92 \text{ mA cm}^{-2}$,
- Voltaje de circuito abierto: $V_{max} = 0.66 \text{ V}$
- Eficiencia de conversión de energía: $\eta = 4.5\%$

La DSSC con electrodos compuestos de TiO_2 – MWCNT planteado en [35] se analizó con espectroscopia Raman, microscopia Raman y Microscopia electrónica de barrido de emisión de campo (FE-SEM). El rol del MWCNT fue estudiado con la espectroscopia de impedancia electroquímica. El resultado más relevante es el siguiente:

- A mayor concentración de MWCNT, la conductividad de los electrodos se reduce, lo que puede ser consecuencia de la aglomeración del MWCNT y la pérdida de transparencia óptica. (En la tabla 7 se observan las características del electrodo con diferentes concentraciones de MWCNT).
- La Mayor eficiencia se obtuvo con 0,025 % wt (weight percent).

Tabla 7. Características del electrodo compuesto por TiO_2 - MWCNT

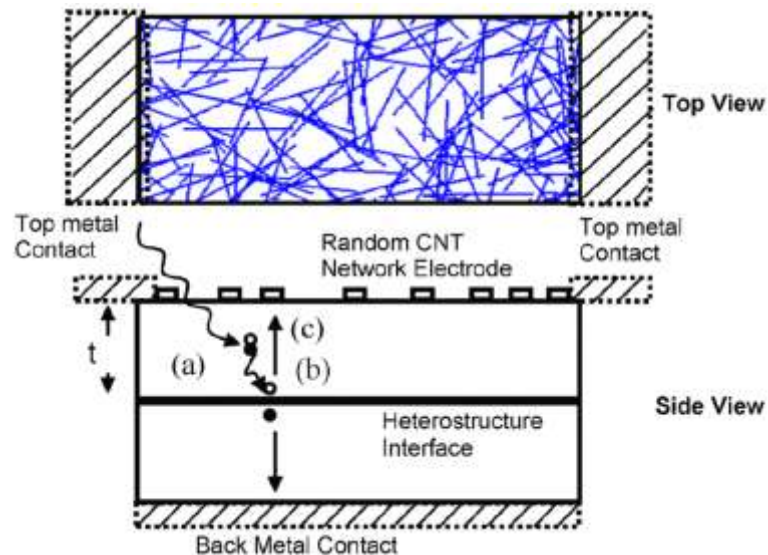
MWCNTs (%wt)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF	η (%)
0	0.76	14.41	0.58	6.31
0.01	0.78	14.41	0.60	6.77
0.02	0.79	17.25	0.72	9.79
0.025	0.79	16.99	0.77	10.29
0.03	0.78	12.38	0.59	5.67
0.05	0.74	11.81	0.52	4.57
0.075	0.69	11.12	0.49	3.75
0.1	0.68	11.11	0.46	3.52

T. Sawatsuk, A. Chindaduang, C. Sae-kung, S. Pratontep & G. Tumcharern. Dye-sensitized solar cells based on TiO_2 -MWCNTs composite electrodes: Performance improvement and their mechanisms. *Diamond & Related Materials*. 2009. Vol. 18. P. 524–527.

En la Universidad de Purdue (EEUU) se usaron redes aleatorias de CNT como electrodo transparente [36]. Los resultados de simulación muestran que no es necesaria mucha densidad en la red de CNT si no se requiere y de hecho, degrada el rendimiento de la celda solar y la optimización de la densidad del CNT es fundamental para lograr el mejor equilibrio de la transparencia frente a todas las eficiencias de la celda solar.

En la Ilustración 14 se muestra el esquema de la celda en vista superior y frontal, en la vista frontal se observa el proceso de la acción de celdas solares, el cual se pueden dividir de la siguiente manera: (a) la generación y difusión del excitón, (b) la disociación del excitón, (c) el transporte de carga, recolección y transporte a través de la red aleatoria de CNT.

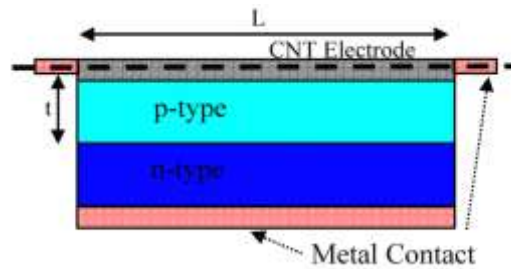
Ilustración 14. Geometría orgánica de celdas solares con red aleatoria de CNT como “back contact”.



N. Pimparkar, M. Chowalla, & M. A. Alam. Device optimization for organic photovoltaics with CNT networks as transparent electrode. *Novel Materials and Devices*. 2008. 978-1-4244-1641-7/0. P. 1-4

En la Ilustración 15 se muestra el esquema de la celda solar usado para la simulación. Aquí, t es el espesor de capa activa y L es la longitud del electrodo de CNT y la distancia entre los contactos metálicos.

Ilustración 15. Estructura de celda solar con unión PN simple con una capa delgada de red de CNT con una conductancia efectiva, utilizada para simular el transporte de carga.



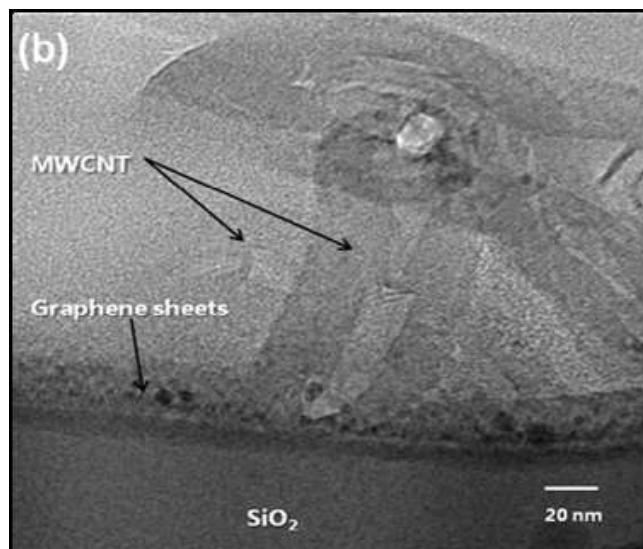
N. Pimparkar, M. Chowalla, & M. A. Alam. Device optimization for organic photovoltaics with CNT networks as transparent electrode. *Novel Materials and Devices*. 2008. 978-1-4244-1641-7/0. P. 1-4

Las nanoestructuras basadas en grafeno multicapa GMWCNT, usados como contra-electrodo para DSSC [25]. La concentración de GMWNTs fue de 0.25 wt%, donde los CNT están verticalmente alineados. Las propiedades electro-químicas del GMWNT fueron comparados con los contra-electrodos de MWNT donde se obtuvo:

- Eficiencia (η) de 3%, factor de llenado (FF) de 0,69%
- Densidad de corriente de corto circuito (JSC) de 5.6 mA/cm²
- Voltaje de circuito abierto (VOC) 0,76V

En la Ilustración 16 se observa la imagen obtenida con la microscopía HRTEM de los GMWCNT.

Ilustración 16. Imagen HRTEM de la sección transversal de los GMWNTs.



C. Hyonkwang, H. Sookyun, K. Hyunguk, & J. MinHyun. Graphene-based carbon nano structure as counter electrode for dye-sensitized solar cells. Kyoto-Advanced Nanotechnology Network. [En línea] [Citado el: 01 de 10 de 2011.] <http://www.jaist.ac.jp/NanoNet/>.

En [37] fabricaron películas delgadas de SWCNT como contra-electrodos para DSC, donde las películas de redes aleatorias de SWCNT ópticamente transparente sintetizados por el método de aerosol CVD y pintado en seco sobre substratos de plástico PET. En la ilustración 16 se muestra el esquema del contra-electrodo de CNT planteado en el estudio. Los resultados se muestran en la Tabla 8. En la investigación finalmente se obtuvo:

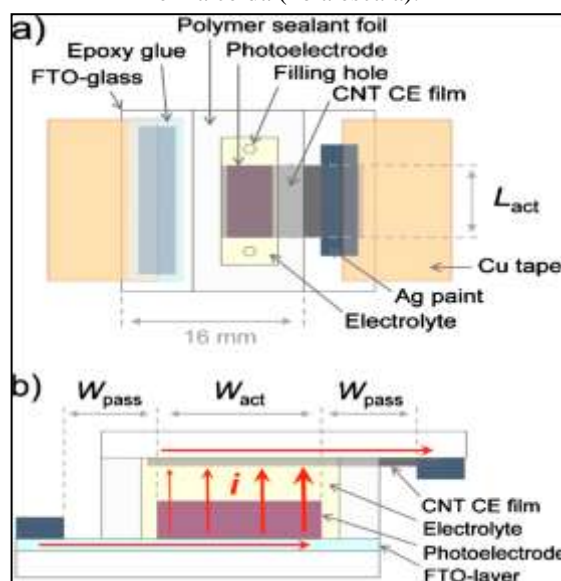
- Resistencia de la lamina: $60 \Omega/\text{cm}^2$
- Eficiencia de conversión de energía del contra-electrodo: 2.5%

Tabla 8. Parámetros típicos fotovoltaicos.

Cell	I (% of one sun)	i_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
CNT-DSC	100	5.15	0.680	21.2	0.743
Ref. DSC	100	11.0	0.687	58.0	4.40
CNT-DSC	43	3.48	0.661	26.2	1.40
Ref. DSC	43	4.52	0.671	67.1	4.73
CNT-DSC	8	0.688	0.609	47.1	2.47
Ref. DSC	8	0.986	0.617	71.0	5.40
CNT-DSC	unctrl	0.0611	0.509	51.7	N.A.
Ref. DSC	unctrl	0.0910	0.504	60.9	N.A.

K. Aitola, A. Kaskela. Et. Al. Single-Walled Carbon Nanotube Thin-Film Counter Electrodes for Indium Tin Oxide-Free Plastic Dye Solar Cells. *Journal of The Electrochemical Society*. 2010. Vol. 157. 0013-4651. B1831-B1837

Ilustración 17. (a) Vista superior que muestra los componentes y la integración del contra-electrodo (más o menos a escala). (b) Sección transversal esquemática vista que muestra el flujo de corriente eléctrica en la celda (no a escala).



K. Aitola, A. Kaskela. Et. Al. Single-Walled Carbon Nanotube Thin-Film Counter Electrodes for Indium Tin Oxide-Free Plastic Dye Solar Cells. *Journal of The Electrochemical Society*. 2010. Vol. 157. 0013-4651. B1831-B1837

4. ESTADO DEL ARTE DE LA SIMULACION DE CELDAS SOLARES CON NANOTUBOS DE CARBONO

En esta sección se presentan los avances de investigación relacionados a la simulación, abordada en las pasantías de investigación.

La solución numérica que se implementa en las herramientas de simulación para solucionar problemas con celdas solares es como sigue:

- Transformación de las ecuaciones diferenciales en ecuaciones en diferencias en una cuadrícula espacial.
- Conseguir gran conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales.
- El uso de un método generalizado de Newton para resolver las ecuaciones, resultando una secuencia iterativa de ecuaciones matriciales.

Las herramientas de simulación para celdas solares usadas:

- SCAP1D (Lundstrom/Schwartz ~1979)
 - o x-Si solar cells (1D)
- SCAP2D (Gray/Schwartz ~ 1981)
 - o x-Si solar cells (2D)
- PUPHS (Lundstrom, et. al. mid-1980s)
 - o III-V heterostructure solar cells (1D)
- TFSSP (Gray/Schwartz mid-1980s)
 - o Amorphous Si solar cells (1D)
- ADEPT (Gray, et. al. desde 1980)
 - o ADevice Emulation Program and Tool(box)
 - o Arbitrary heterostructure solar cells (CIS, CdTe, a-Si, Si, GaAs, AlGaAs, HgCdTe, InGaP, InGaN, etc.)
 - o Fortran versión (1D, on Nanohub)
 - o C versiones (1D, 2D --3D)
 - o Matlab TM toolbox (entorno 1D, 2D, 3D)

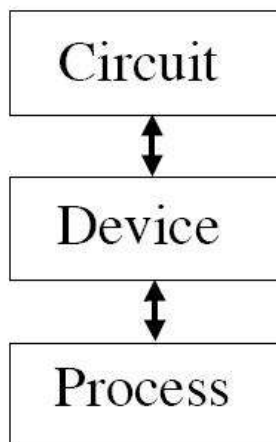
- MEDICI, 2D Device Simulation Program.
- SILVACO
- Molecular Workbench
- COMSOL
- NanoFabrics: Spatial computing using molecular electronics

La tecnología TCAD [38] de diseño asistido por computador, es una rama del diseño electrónico que modela la fabricación de semiconductores y la operación del dispositivo semiconductor. El modelamiento de la fabricación de dispositivos se denomina TCAD de Proceso (comportamiento) y el modelado de la operación del dispositivo se denomina TCAD de dispositivos (características). Incluye el modelado de las etapas del proceso y el modelado del comportamiento de los dispositivos eléctricos basados en la física fundamental.

Simulación de procesos es una representación de modelos basados en procesos técnicos químicos, físicos, biológicos y otras operaciones unitarias del software.

Simulación de dispositivos simulan las características eléctricas de los dispositivos semiconductores, como respuesta a las condiciones de frontera eléctricas externas externas, térmicas u ópticas impuestas a la estructura.

Ilustración 18. Jerarquía de las herramientas de construcción TCAD desde el nivel de procesos ha circuitos.



Simulating Solar Cell Devices Using Silvaco TCAD Tools. 2008. *The Simulation Standard*. Vol. 18, No. 2. Pags 1-3.

4.1 HERRAMIENTAS DE SIMULACION

4.1.1 SILVACO

Permite investigaciones de las propiedades eléctricas de la celda solar bajo iluminación en 2D y 3D. Además, permite la simulación de celdas solares de amplia superficie con textura. [39]

4.1.1.1 Módulos TCAD incluidos en la simulación de Celdas solares

- a. ***S-Pisces***: Simulador avanzado de dispositivos 2D para las tecnologías basadas en silicio que incorpora tanto la deriva-difusión y ecuaciones de balance de energía de transporte.
- b. ***Blaze***: Simula dispositivos 2D de celdas solares fabricadas con materiales avanzados. Incluye una librería de semiconductores binarios, ternarios y cuaternarios. Ha incorporado modelos para simular el estado de la técnica de celdas solares multi-unión.
- c. ***Device3D***: Es un simulador 3D para dispositivos de silicio y otras tecnologías a base de materiales. Se analizan las características DC, AC y en el dominio del tiempo, de una gran variedad de dispositivos de silicio, III-V, VI-II y IV-IV.
- d. ***Luminous and Luminous3D***: Son simuladores 2D y 3D especialmente diseñados para la absorción de la luz y el modelo de foto-generación en celdas solares no planas.
- e. ***TFT y TFT3D***: Son simuladores avanzados de dispositivos 2D y 3D, equipado con los modelos físicos y técnicas numéricas especializadas requeridas para simular dispositivos amorfos o policristalinos incluyendo transistores de película delgada.

4.1.1.2 Características de celdas solares simuladas

Eficiencia de recolección, respuesta espectral, voltaje de circuito abierto, corriente de cortocircuito, foto-generación de portadores en el dispositivo durante la incidencia de luz (útil para la simulación de dispositivos multi-unión), una vez que las tasas de foto-

generación se obtienen, se pueden evaluar las corrientes en los terminales para determinar la eficiencia cuántica de la celda solar. Características I-V, respuesta espectral, eficiencia cuántica, tasas de foto-generación, distribución potencial.

4.1.1.3 SILVACO-ATLAS

Características: [40]

- a. Software de simulación de dispositivos que predice el comportamiento eléctrico, óptico y térmico de dispositivos semiconductores.
- b. Usado para el análisis del comportamiento AC, DC y respuesta transitoria. Entorno 2D o 3D.
- c. Basado en el método de elementos finitos.
- d. Pasos de simulación:
 - 1. Creación de la cuadrícula;
 - 2. Definición de los parámetros del material, el dopaje, la trampa, etc.;
 - 3. Solución en equilibrio termodinámico (potencial eléctrico) y
 - 4. Cálculo de la curva IV bajo iluminación.

4.1.2 COMSOL MULTIPHYSICS

4.1.2.1 Descripción

Paquete de software comercial para modelar y resolver problemas basados en ecuaciones en derivadas parciales (EDP). Las ecuaciones en derivadas parciales se resuelven usando el método de elementos finitos (FEM). FEM es un método general basado en computadora para resolver numéricamente ecuaciones en derivadas parciales.

4.1.2.2 Características

- a) Describe con precisión lo que sucede en el mundo real a través del entorno de simulación que permite la traducción de las leyes físicas en su forma intelectual.

- b) El entorno de simulación incluye la posibilidad de añadir un efecto físico al modelo.
- c) Plataforma flexible que permite modelar todos los aspectos físicos relevantes de los diseños.
- d) Compatibilidad: Cada tipo de simulación incluida en el paquete tiene la capacidad de ser combinada con cualquier otra, es decir, tal como se refleja en el mundo real. Por ejemplo en la naturaleza, la electricidad está siempre acompañada por algún efecto térmico, los dos son totalmente compatibles. Esto garantiza realizar modelos multifísicos.
- e) Adaptabilidad: A medida que las necesidades del modelo cambian, también lo hace el software. Es decir, si se desea incluir otro efecto físico, simplemente se agregar o si una de las entradas del modelo requiere una expresión matemática, también se puede ingresar.
- f) Geometría parametrizada, mallado interactivo, y secuencias personalizadas del Solver, puede adaptarse rápidamente a los requerimientos del modelo implementado.
- g) Soporta Shared Memory (CPU) y Distributed Memory (Clúster). Donde este último puede ser Windows HPC Server 2008 o Linux.

4.1.3 MEDICI

Esta herramienta de simulación predice las características eléctricas de estructuras bidimensionales bajo condiciones de funcionamiento especificadas por el usuario [41]. Es aplicable a una amplia variedad de tecnologías, que van desde dispositivos micrométricos a estructuras de gran potencia. Las aplicaciones típicas incluyen diodos, BJT, MOSFET y JFET, MESFETs, HBT y HEMT, IGBT, CCD y GTO.

4.1.3.1 Utilidades del simulador

- a) Determinar las características de I-V, ganancia y velocidad de transistores y diodos.

- b) Deducir la operación interna del dispositivo a través del potencial, fuente, cargas portadoras, tasa de temperatura de ionización y distribución de densidad de corriente.
- c) Diseñar dispositivos para optimizar su comportamiento.
- d) Investigar mecanismos de falla, tales como los efectos del calentamiento de los electrones.
- e) Estudiar los efectos de radiación transiente.

4.1.3.2 Características de simulación

- a) Solucionadores autoconsistentes de la ecuación de Poisson, ecuaciones de corriente continua del par electron-hueco y sus ecuaciones de balance de energía.
- b) Análisis de estado estable, transiente y señales AC.
- c) Soluciones de corriente continua en insuladores.
- d) Coordenadas rectangulares o cilíndricas.
- e) Condiciones de voltaje, corriente y de frontera para electrodos.
- f) Resistencia de contactos, contactos Schottky y elementos RLC
- g) Soporta múltiples materiales tales como Si, Ge, GaAs, SiGe, AlGaAs y SiC, tales como materiales definidos por el usuario.
- h) Curvas automáticas de I-V y algoritmos “time-step”
- i) Métodos de soluciones robustas y algoritmos.
- j) Condiciones de frontera periódicas.
- k) Optimización del comportamiento de dispositivos y calibración del modelo.

4.1.3.3 Módulos de para aplicaciones avanzadas

- a) Análisis de circuitos.
- b) Temperatura de latencia.
- c) Dispositivos programables.
- d) Dispositivos ópticos.
- e) Dispositivos con hetero-unión
- f) Materiales inotrópicos.

4.1.3.4 Requerimientos de sistema

- a) Plataforma: Estación de trabajo UNIX de Hewlett-Packard, IBM y Sun Microsystems.
- b) Memoria: 104 Mbyte para la versión de 10,000.
- c) Espacio en Disco: 17 Mbyte para ejecución.

4.1.4 NANOHUB

nanoHUB.org (<http://nanohub.org>) es un recurso en línea para la investigación en nanotecnología computacional. Esta iniciativa es apoyada por la **National Science Foundation** y es operada por la **Red de Nanotecnología Computacional (NCN)** para apoyar la Iniciativa Nacional de Nanotecnología (NNI) de los Estados Unidos, mediante la creación y funcionamiento de una constante evolución de la ciber-plataforma para el intercambio y la simulación de recursos educativos. La plataforma es desarrollada por la universidad de Purdue de Estados Unidos.

Alberga una colección de programas de simulación de fenómenos a nanoescala que se ejecutan en la nube y se accede a través de un navegador web. Además, aloja presentaciones en línea, cursos y módulos de aprendizaje, podcasts, animaciones y materiales didácticos, para aprender acerca de los programas de simulación y sobre la nanotecnología.

4.2 AVANCES DE INVESTIGACION RELEVANTES

En [42] se propone el modelamiento multiescala de Celdas solares en una PVM (Parallel Virtual Machine) basada en la configuración HPC (High Performance Computing). En la Ilustración 19 se sugiere el proceso a llevar a cabo en este tipo de modelamiento.

Ilustración 19. Modelamiento multi-escala de Celdas Solares



Multi Scale Modeling of Nano Enable Solar cell With Implementation on an HPC Setup. R. Pathak, S. Joshi & P. Kotak. Kharagpur, India : IEEE, 2009. Third International Conference on Power Systems. 978-1-4244-4331-4.

Se usó el lenguaje C# MPI (Message Passing Interface) en un entorno MCCS (Microsoft Compute Cluster Server), donde MPI ofrece un protocolo de comunicación de lenguaje independiente usado para comunicación punto a punto y comunicación mutua para el desarrollo de computación paralela.

Los parámetros a tener en cuenta en la simulación son:

- Nivel de fermi de un semiconductor intrínseco:

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_V}{N_C} \right) \text{ Ecuación 1}$$

- Aproximación analítica para el estado 1s menor excitado:

$$E^* \approx E_g + \left(\frac{h^2}{8r^2} \right) \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right) - \left(\frac{1.8q^2}{r} \right) \text{ Ecuación 2}$$

- Propiedades eléctricas de una DSSC:

- o Densidad de corriente de salida:

$$J = J_{sc} \left[1 - e^{\frac{q(V - V_{oc})}{nK_S T}} \right] \text{ Ecuación 3}$$

- Corriente de materiales fotovoltaicos de fullerenos:

$$I = I_0 \left[e^{\frac{q(V-IR_s)}{nKT}} - 1 \right] + \frac{V+IR_s}{R_{sh}} - I_p \text{ Ecuación 4}$$

- Factor de llenado:

$$FF = \frac{\frac{qV_{oc}}{kT} - \ln\left(0.72 + \frac{qV_{oc}}{kT}\right)}{1 + \frac{qV_{oc}}{kT}} \text{ Ecuación 5}$$

- Absorción total de luz:

$$G(\lambda, y) = \phi_0 \alpha(\lambda) e^{[-y\alpha(\lambda)]} \text{ Ecuación 6}$$

Desde un nivel de abstracción no puede realmente representar el fenómeno, por lo que se deben utilizar los modelos en varios niveles de abstracción y sincronizar el resultado con los datos experimentales así:

Paso 1. Darse cuenta de las fórmulas para la configuración de alto rendimiento.

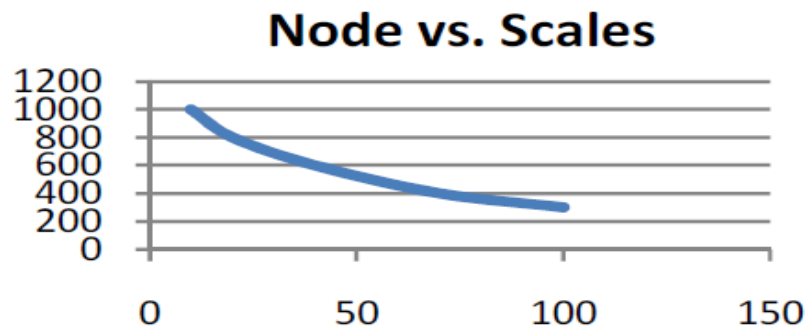
Paso 2. Alimentar los resultados de los datos experimentales.

Paso 3. Ejecutar la sincronización de la configuración del HPC, como se muestra.

Paso 4. Obtener los resultados y comprobar de nuevo.

Al ejecutar el código de demostración de optimización numérica extrema para la computación del clúster en configuración de cuatro nodos (Ver anexo 1) se obtiene el resultado expuesto en la Ilustración 20.

Ilustración 20. Nodo vs escalas (en nanómetros). Ejecución de múltiples escalas en la configuración HPC.



Multi Scale Modeling of Nano Enable Solar cell With Implementation on an HPC Setup. R. Pathak, S. Joshi & P. Kotak. Kharagpur, India : IEEE, 2009. Third International Conference on Power Systems. 978-1-4244-4331-4.

Ilustración 21. Resultados de los cálculos para varias escalas.

```

C:\WINDOWS\system32\cmd.exe

C:\>cd "C:\Program Files\Microsoft Compute Cluster Pack\Bin"

C:\Program Files\Microsoft Compute Cluster Pack\Bin>dir
Volume in drive C has no label.
Volume Serial Number is C040-999A

Directory of C:\Program Files\Microsoft Compute Cluster Pack\Bin

01/01/2009  02:50 AM    <DIR>          .
01/01/2009  02:50 AM    <DIR>          ..
06/28/2006  12:28 PM             84,824 ccapi.dll
01/01/2009  02:36 AM             5,632 hydroCode.exe
01/01/2009  02:49 AM             5,632 hydroCode1.exe
12/16/2008  09:35 PM             6,656 hydroCode3.exe
11/08/2008  07:58 PM             5,632 hydroCode4.exe
06/02/2006  05:29 PM          333,656 mpiexec.exe
12/16/2008  09:36 PM              77 Readme.txt
06/02/2006  05:29 PM          327,000 snpd.exe
               8 File(s)          769,109 bytes
               2 Dir(s)  39,745,626,112 bytes free

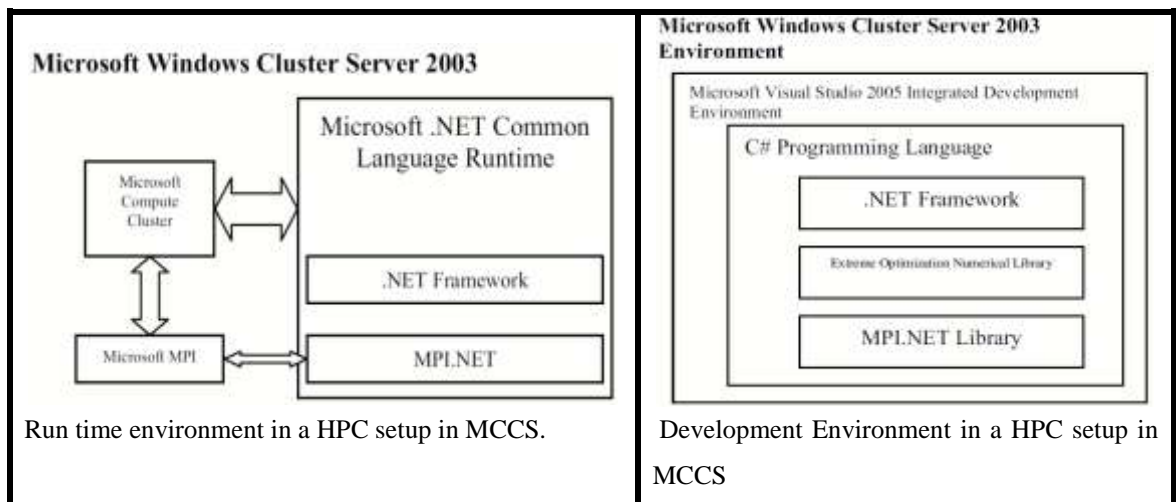
C:\Program Files\Microsoft Compute Cluster Pack\Bin>mpiexec -n 8 hydroCode1.exe
Check from process 1
Process 1: Device Specific Optical and Electrical Property
Check from process 5
Process 5: Idle
Check from process 4
Process 4: Idle
Check from process 3
Process 3: Quantum Dot/Thin Film/Dye Sensitized Quantum Level Property
Check from process 2
Process 2: Nano-Crystalline/PN-Junction Basic Properties
Check from process 6
Process 6: Idle
Check from process 0
Process 0: Fundamental Semiconductor Property
Check from process 7
Process 7: Idle
All processes finished

C:\Program Files\Microsoft Compute Cluster Pack\Bin>

```

Multi Scale Modeling of Nano Enable Solar cell With Implementation on an HPC Setup. R. Pathak, S. Joshi & P. Kotak. Kharagpur, India : IEEE, 2009. Third International Conference on Power Systems. 978-1-4244-4331-4.

De acuerdo a lo anteriormente planteado,



Maquina Virtual Paralela (PVM) sobre “Open Source”: Desarrollado en un entorno basado en Linux, el programa fue codificado en C y compilado con un compilador GNU

GCC. La configuración de la máquina virtual fue realizada mediante la configuración de la consola PVM.

Ilustración 22. Contraste de características entre configuraciones HPC.

HPC Setup	Operating System	Math Library	Communication Library	System requirements	Performance	Easy to use
MPI	Microsoft Windows Server 2003 Compute Cluster Edition 64 bit	Extreme Optimization Numerical Library for .NET	MPI.NET	High: It needs of 64bit CPU, 4GB Ram, lots of Gig's of hard disk.	Programs written in Visual C++ can bring a significant gain in performance over those of C#.	Easy to setup and gave us a rich feature, instruction and function set
PVM	Open SUSE-11.0-x86_64 64 bit	C, parallel math library	PVM-3.4.5.x86_64	Minimal: It cans create a cluster with low end machines.	Highest performance.	Difficult to configure

Por otro lado en [43] los criterios del modelado de celdas solares que proponen son (La ilustración 21 expone el sistema del modelado y la ilustración 22 muestra el esquema de la celda del estudio):

1. Comprensión de la operación del dispositivo medido:

- La dependencia de las características de los terminales (V_{oc} , J_{SC} , FF , η)
- Estructuras del dispositivo (dimensiones, selección de materiales, el dopaje, etc.).
- Parámetros del material (movilidad de portadores, vida útil, etc.)

2. Predicciones de rendimiento (eficiencia):

- Diferentes condiciones de operación: Temperatura, las condiciones de iluminación, etc.

3. Planteamiento de las Condiciones de frontera:

- Ley de la unión:

$$p_N(-x_N) = \frac{n_i^2}{N_D} e^{\frac{qV}{kT}} \text{ Ecuación 7}$$

$$n_P(x_P) = \frac{n_i^2}{N_A} e^{\frac{qV}{kT}} \text{ Ecuación 8}$$

- Contactos:

$$\frac{d\Delta p}{dx} = \frac{S_{F,eff}}{D_p} \Delta p(-W_N) \text{ Ecuación 9}$$

$$\frac{d\Delta n}{dx} = \frac{S_{BSF}}{D_n} \Delta n(-W_P) \text{ Ecuación 10}$$

4. Definición de Parámetros:

- Voltaje de circuito abierto:

$$V_{OC} = kT \ln \frac{N_B \tau_m J_L}{q n_i^2 W} \text{ Ecuación 11}$$

- Factor de llenado:

$$FF = \frac{V_{OC} - \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{qV_{OC}}{kT} + 0,72 \right]}{V_{OC} + \frac{kT}{q}} \text{ Ecuación 12}$$

- Eficiencia:

$$\eta = \frac{V_{OC} FF J_{SC}}{P_{in}} \text{ Ecuación 13}$$

- Densidad de corriente:

$$J_{SC} = J_L \text{ Ecuación 14}$$

5. Deducción de las ecuaciones de los semiconductores:

- Ecuación de Poisson:

$$\nabla \cdot \epsilon \nabla V = -q(p - n + N) \text{ Ecuación 15}$$

- Ecuaciones de continuidad:

$$\nabla \cdot \vec{J}_p = q \left(G - R_p - \frac{\partial p}{\partial t} \right) \text{ Ecuación 16}$$

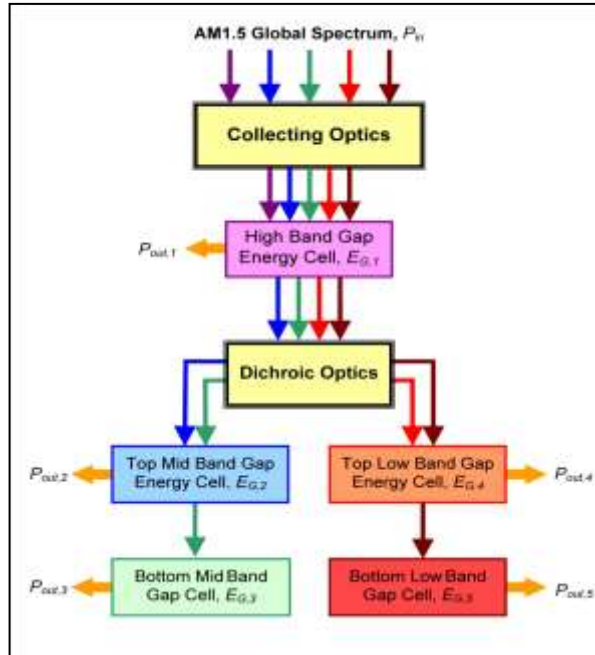
$$\nabla \cdot \vec{J}_n = -q \left(G - R_p - \frac{\partial n}{\partial t} \right) \text{ Ecuación 17}$$

- Ecuaciones Drift-Diffusion:

$$\vec{J}_p = -q\mu_p \nabla(V - V_p) - kT\mu_p \nabla p \quad \text{Ecuación 18}$$

$$\vec{J}_n = -q\mu_n \nabla(V + V_n) + kT\mu_n \nabla n \quad \text{Ecuación 19}$$

Ilustración 23. Sistema de modelado



J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>

En cuanto a la simulación, en [44] exponen:

- Parámetros de Entrada:
 - Estructura de la célula solar: Composición, los contactos, el dopaje, las dimensiones.
 - Las propiedades del material: Constante dieléctrica, la brecha de la banda de energía prohibida, afinidad electrónica, otros parámetros de la banda, los coeficientes de absorción, cargas portadoras movilidades, los parámetros de recombinación, etc.
 - Las condiciones de funcionamiento: Temperatura de funcionamiento, aplicado Voltaje de polarización, el espectro de iluminación, de pequeña señal de frecuencia, los parámetros transitorios.

- Parámetros de Salida:

La solución numérica proporciona el valor del potencial V , y la concentración de portadores N y P , en cada punto dentro del dispositivo, desde donde se pueda calcular y mostrar:

- Las características del terminal, es decir, curva I-V, eficiencia de las celdas, la respuesta espectral, etc. [predictivo].
- Una visión microscópica de los parámetros internos, por ejemplo, la tasa de recombinación (es decir, pérdidas) [diagnóstico]

La simulación numérica detallada mencionada anteriormente se define así:

- Basado en la física de dispositivos más rigurosos.
 - La solución numérica evita la necesidad de simplificar hipótesis, es decir, permite que los parámetros variables en el espacio.
 - Proporciona la capacidad de predicción.
- Transformar las ecuaciones diferenciales en ecuaciones en diferencias en una cuadrícula espacial - se obtiene un gran conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales.
- Utilizar un método de Newton generalizado para resolver - resultando una secuencia iterativa de ecuaciones matriciales:

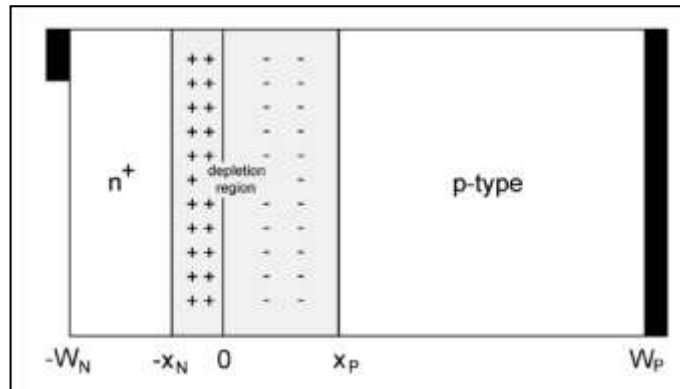
$$J(v^k)\Delta v^{k+1} = -F(v^k) \text{ Ecuación 20}$$

- $v = [p \ n \ V]$; $F(v^k)$ es el conjunto de ecuaciones diferenciales
- $J(\Delta v^k)$ es una matriz de bloques dispersos tri-diagonal de orden $3n$, donde “ n ” es el número de puntos en la malla (1D).
- En 2D (cuadrícula $n \times m$), $J(\Delta v^k)$ es una matriz de bloques dispersos tri-diagonal de orden $3nm$.

Terminal Características (I-V, SR, C-V, etc.):

- Proporciona la capacidad de diagnóstico.
- Puede examinar los parámetros internos (banda de energía, la recombinación, etc.)
- Capacidad para comprobar la simplificación de hipótesis en el modelado analítico.

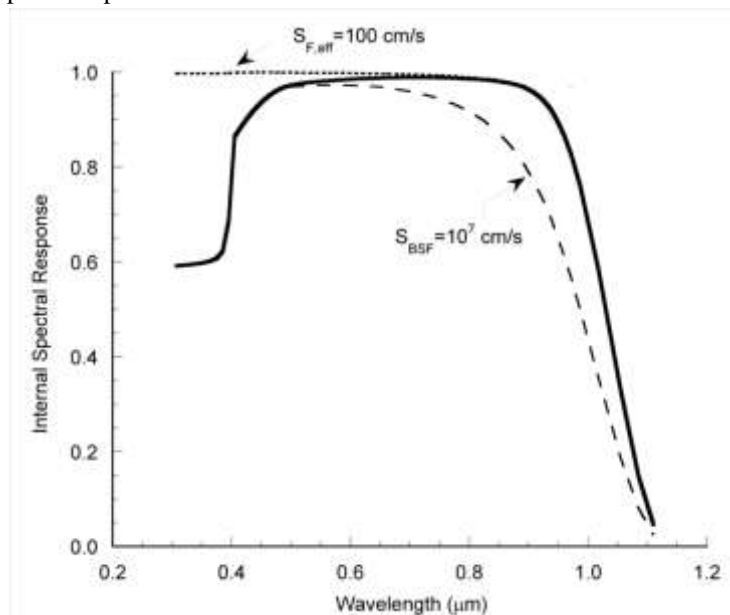
Ilustración 24. Modelo de Celda para el estudio



J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>

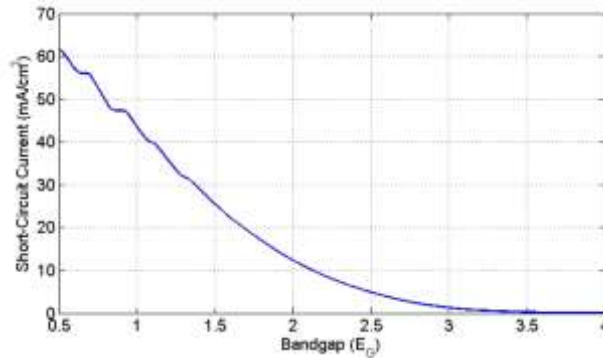
Las ilustraciones 25 a la 27 están graficados los resultados de la simulación realizada en esta investigación.

Ilustración 25. Respuesta espectral ideal



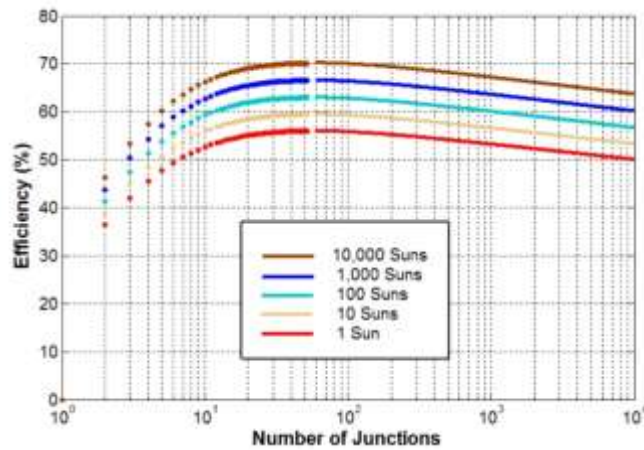
J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>

Ilustración 26. Comportamiento ideal de la corriente de corto-circuito vs bandgap



J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>

Ilustración 27. Límites fundamentales



J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>

El modelado de celdas solares según [45] debe tener en cuenta lo siguiente:

- Propiedades ópticas de los materiales de las celdas solares:

- Coeficiente de absorción:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \text{ Ecuación 21}$$

- Intensidad de corriente transmitida a través una capa de grosor “x”, acorde a la intensidad de corriente incidente “I₀”:

$$I = I_0 e^{-\alpha x} \text{ Ecuación 22}$$

- Recubrimiento anti-reflexión
 - Fotoluminiscencia.

- Ecuaciones de las celdas solares:

○ Mecanismos importantes de Generación – Recombinación:

1- Modelo analítico:

$$I = I_{ph} - I_S \left(e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right) \text{ Ecuación 23}$$

$$FF = \frac{P_{MAX}}{P_T} = \frac{I_{MP} * V_{MP}}{I_{SC} * V_{OC}} \text{ Ecuación 24}$$

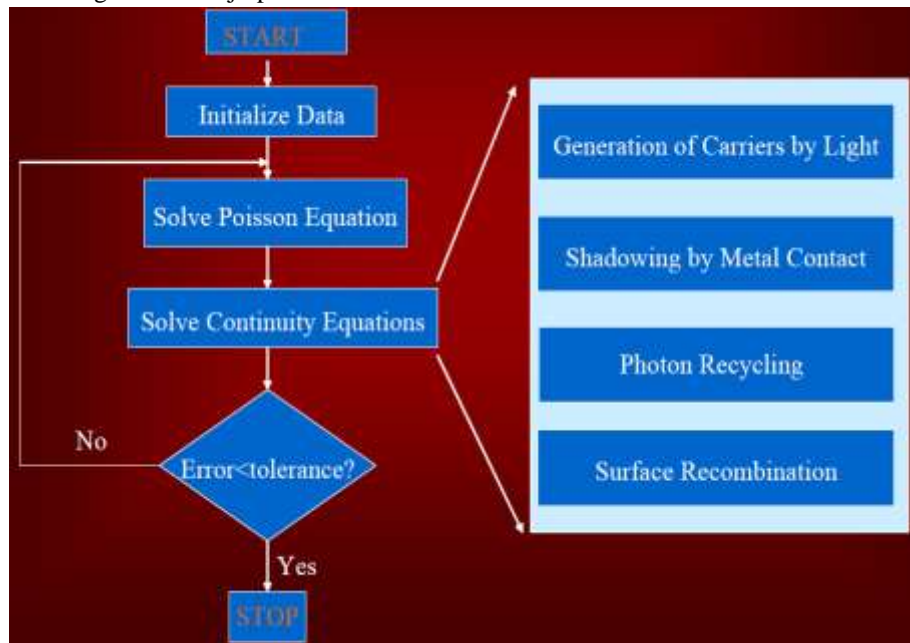
2- Reciclaje de fotones.

3- Eficiencia cuántica en la recolección de corriente (electrones). También llamada “IPCE” (Incident-Photon-to-electron Conversion Efficiency).

4- “Shadowing” o proyección de sombras curvas sobre superficies curvas en las graficas ·D computacionales.

La simulación se realizó con el software “SILVACO”. En la Ilustración 28 se observa el diagrama de flujo que computacionalmente se ejecuta para resolver las ecuaciones de la celda solar.

Ilustración 28. Diagrama de flujo para la solución numérica de las ecuaciones de la celda solar



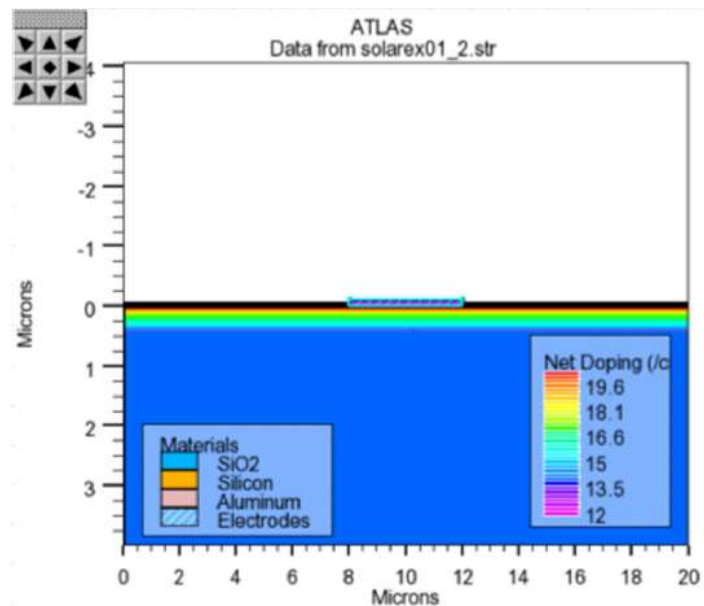
Dragica Vasileska; Gerhard Klimeck (2010), "Solar Cells Operation and Modeling," <https://nanohub.org/resources/9328>

La herramienta computacional ATLAS del software SILVACO es usada para simular celdas solares. Algunos modelos simulados en Silvaco son expuestos en [46]:

- SSUPREM4/SPISCES/LUMINOUS
 - Construcción del dopaje de celdas solares y la geometría en ATHENA
 - Simulación de la corriente de cortocircuito
 - Simulación de la tensión a circuito abierto
 - Simulación de la respuesta espectral
 - Simulación de la eficiencia cuántica

La estructura de la celda simulada (ver código en el Anexo 2) se muestra en la ilustración 29.

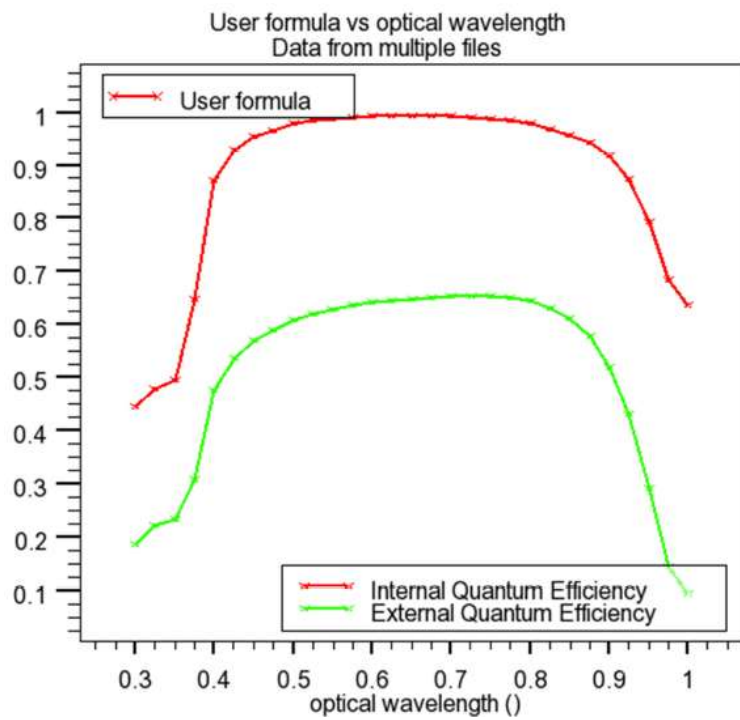
Ilustración 29. Estructura de celda inicialmente simulada



Dragica Vasileska (2011), "SILVACO Simulation of Solar Cells," <https://nanohub.org/resources/10770>.

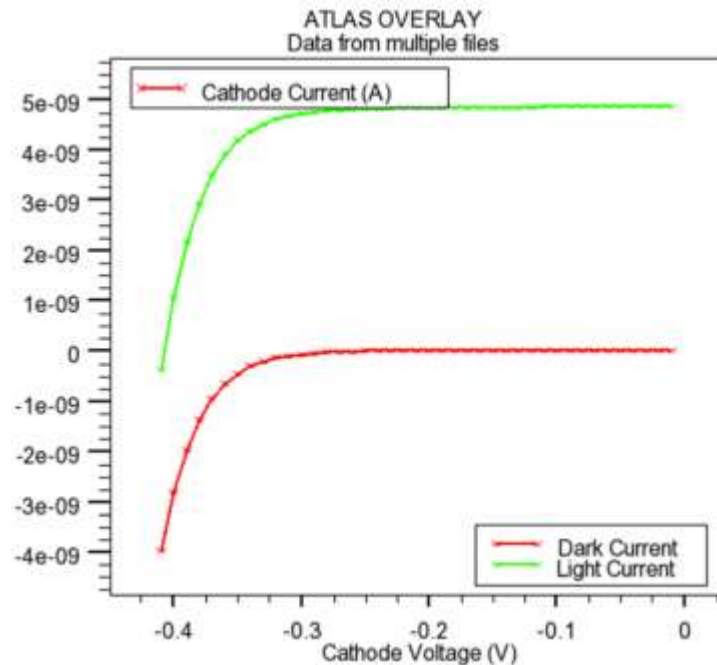
Los resultados obtenidos al simular la celda de la Ilustración 29, son graficados en las Ilustraciones 30 y 31.

Ilustración 30. Eficiencias interna y externa de la celda solar simulada.



Dragica Vasileska (2011), "SILVACO Simulation of Solar Cells," <https://nanohub.org/resources/10770>.

Ilustración 31. Corrientes del ánodo y cátodo de la celda solar simulada



Dragica Vasileska (2011), "SILVACO Simulation of Solar Cells," <https://nanohub.org/resources/10770>.

5. RESULTADOS

5.1 Presentación de la propuesta a nivel Nacional

Selección como Joven Investigador, en la convocatoria de COLCIENCIAS 2011, donde se dará continuidad a la investigación iniciada durante las pasantías.

5.2 Presentación de la propuesta de investigación en eventos internacionales

5.2.1 CPIASR International Collaboration Forum desarrollado por la Universidad de Purdue en West Lafayette, Indiana, los días 11-13 de Octubre del 2011.

5.2.2 Aprobación del resumen de la propuesta de investigación en el evento NANOPERU2011, realizado en la ciudad de Lima, los días 14-16 de noviembre del 2011.

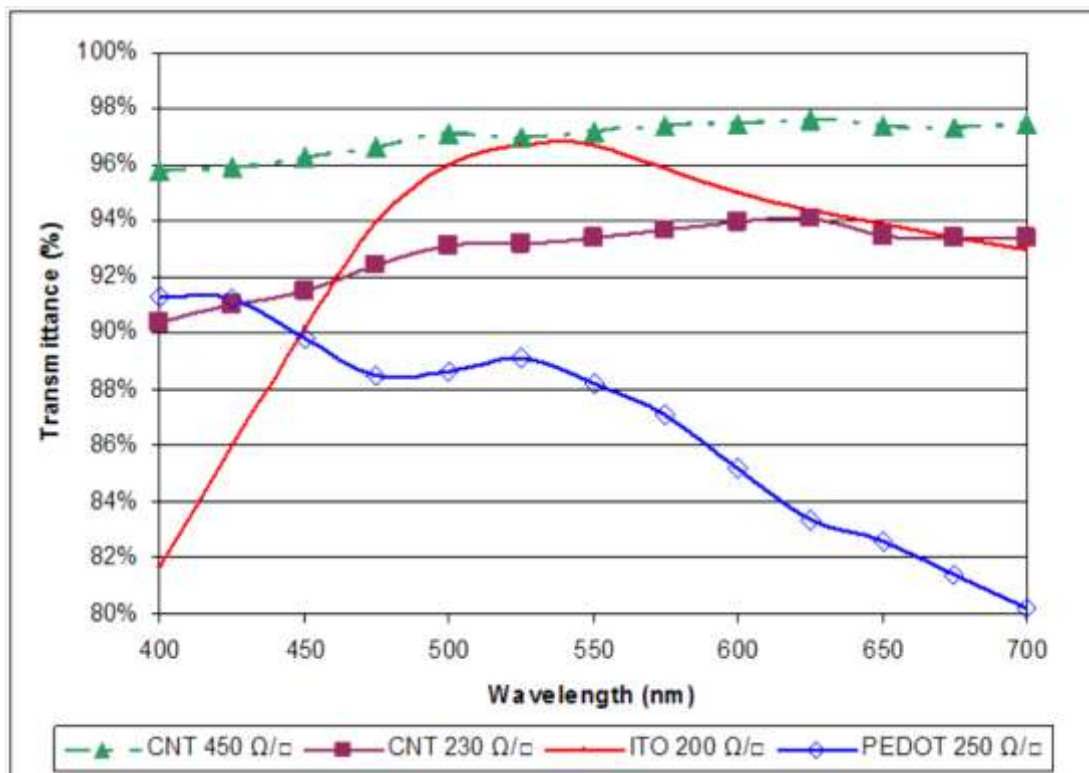
5.3 Identificación de las ventajas de usar CNTs a ITO u otro material en el electrodo de la celda.

En la Tabla 9 se agrupan dichas ventajas y la Ilustración 32 muestra el contraste de la transmitancia de los electrodos fabricados con ITO, CNT y PEDOT.

5.4 Relaciones interinstitucionales

Entre la Universidad Tecnológica de Bolívar y la Universidad de los Andes, específicamente con el Centro de Micro y Nanotecnología “CMUA”.

Ilustración 32. Rendimiento óptico: Transmisión de luz visible de los electrodos de ITO, PEDOT y películas CNT.



Weeks C. Flexible carbon nanotube transparent electrodes. Veritas et Visus. Flexible Substrate. Octubre 2006

Tabla 9. Contraste de las propiedades entre los electrodos de ITO y CNTs

	Método de Fabricación	Grosor	Flexibilidad	Conductividad Eléctrica	Transparencia Óptica	Resistencia laminar	Durabilidad*
CNT	Roll to roll, pulverización, Revestimiento por rotación, fundición, capa por capa, y Langmuir Blodgett.	100 nm de grosor y 1 cm de longitud	Más cercado al color neutral. Elástico entre 1-5% de esfuerzo de tracción. Después del 18% de esfuerzo de tracción, solo se observa un 14% de cambio en la resistencia	Uniforme y lineal. Transparencia ligeramente inferior a 550 nm. CNT fabricados por Arco de descarga resultan con alta conductividad y transparencia.	90-99% luz visible Alta transparencia a través del espectro completo de luz visible (Ilustración 32)	230-450 Ω /sq Adaptada sobre un rango resistivo desde 10 hasta 107 Ω /sq. Controlada mientras se mantiene alta transparencia	Cambio de resistencia menor al 0.5% después de 2500 ciclos. Curvatura de 5mm sin pérdida de eficiencia
ITO	Deposición de capas al vacío, alta deposición a temperaturas alrededor de 600o C.		Tonos amarillos. Se agrieta con un 2,5% de esfuerzo de tracción y antes del 5% alcanza la deformación por tracción.		Máxima transparencia en el rango 500-550 nm	200 Ω /sq	Cambio de Resistencia mayor al 2% después de 100 ciclos. Curvatura de 5mm son 20-25% de pérdida de eficiencia.

Weeks C. Flexible carbon nanotube transparent electrodes. Veritas et Visus. Flexible Substrate. Octubre 2006

Propiedades de los electrodos:

Transparencia óptica

Resistencia de la película.

Flexibilidad

Conductividad

Densidad del CNT.

Diámetro del CNT: 10-20nm.

Longitud del CNT: 5–15 μ m

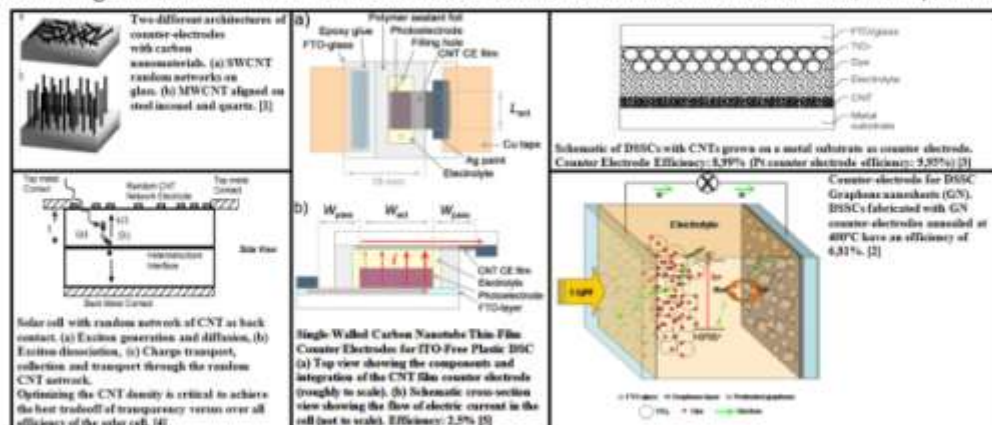
* Prueba de carga cíclica: Prueba de resistencia a la tracción.

TRANSMITANCIA: En la práctica cuando un rayo de luz pasa a través de una solución colorida parte de esta radiación es absorbida y la restante se refleja o se transmite, cuando se mide la cantidad de luz transmitida se le llama transmitancia.

Contribution to Modeling and Simulation for CNT Networks as Transparent Electrode for Organic Solar Cells (Stage I)

This project will introduce the steps to model and simulate of CNT networks as transparent electrode in organic solar cells, so contributing to the development computational nanotechnology to improve solar cell properties.

1. Models of organic solar cells with CNT electrodes: Here are models derived from the literature review, most important for the project.



2. Modeling: Below is the modeling system to be used in the second stage of the project, according to the organic solar cell models presented above.

Top-Down Multi Scale Modeling of Nano Enable Solar cell on HPC (High Performance Computing) Setup:



1. Fundamental Semi-Conductor Property.
2. Device Specific Optical and Electrical Property.
3. Basic Properties of Nano-Crystalline/PN-Junction.
4. Quantum Dot/Thin Film/Dye Sensitized Quantum Level Property.

The following table shows the characteristics of the HPC setups that will give us the criteria for selection of the settings to use for simulating the model, according to the resources of the UTB.

HPC Setup	Operating System	Math Library	Communication Library	System requirements	Performance	Easy to use
MPI	Microsoft Windows Server 2003 Compute Cluster Edition 64 bit	Extreme Optimization Numerical Library for .NET	MPI.NET	High: It needs of 64bit CPU, 4GB Ram, lots of Gig's of hard disk.	Programs written in Visual C++ can bring a significant gain in performance over those of C#.	Easy to setup and gave us a rich feature, instruction and function set
PVM	Open SUSE-11.0-x86_64 64 bit	C, parallel math library	PVM-3.4.3.x86_64	Minimal: It can create a cluster with low end machines.	Highest performance.	Difficult to configure

3. Simulation: According to the HPC setup selected and the type of model to be simulated, we will choose one of the following computational tools for simulation run to be used in the third stage of the project.

3.1 COMPUTATIONAL TOOLS FOR NANODEVICE SIMULATIONS:

- MEDICI, 2D Device Simulation Program
- SCAPS Simulator Program.
- SILVACO
- MOLECULAR WORKBENCH
- ADEPT (A Device Emulation Program and Toolboxes)
- COMSOL

3.2 NUMERICAL SOLUTION. This is the method of numerical solution that usually use the computational tools:

1. Transforming the differential equations in difference equations on a spatial grid. Getting large set of nonlinear differential equations.
2. Using a generalized Newton method to solve. Resulting in an iterative sequence of matrix equations.

2.1 CRITERIA for modeling the CNT Networks as Transparent Electrode:

1. Understanding the operation of the device measured; Device-structures and Material parameters.
2. Predictions of performance (efficiency) at different operating conditions.
3. Boundary conditions: Union Law and Contacts.
4. Parameters:

Network density from CNT.	Sheet conductance.	Sheet resistance.
Absorption coefficient.	Charge collection.	Charge transport.
Transparency.	Anti reflection coating.	Percolation threshold.
Organic layer thickness.	Open circuit voltage.	Short circuit current.
Photocurrent.	Current density.	Fill factor.
Efficiency.		
5. Semiconductor Equations.

References:

1. K. Arino, J. Hahn, et al. Comparison of the solar cell counter electrodes based on different carbon nanostructures. *Thin Solid Films*. 2011. Vol. 519, p. 8125-8134.
2. D.W. Zhang, X.D. Li, et al. Graphene-based counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2011. Vol. 49, Issue 13, P. 4610 - 4613. ISSN 0959-6223.
3. O. Togni, D. Matarazzo & M. Inganäs. Carbon Nanotubes Counter Electrode for Dye-Sensitized Solar Cells. *Physical Technology Review*. 2012. P. 47 - 50.
4. N. Pisparkar, M. Choudhary & M. A. Alam. Device optimization for organic photovoltaics with CNT networks as transparent electrode. *New Materials and Devices*. 2008. 978-1-4244-1641-7. P. 1-4.
5. K. Arino, A. Karkala, et al. Single-Walled Carbon Nanotube Thin-Film Counter Electrodes for Indium Tin Oxide-Free Plastic Dye Solar Cells. *Journal of The Electrochemical Society*. 2010. Vol. 157, 0813-0815. 01831-01837.
6. R. Patlak, S. Joshi. "MPI & PVM based HPC setup for Multi-Scale Modeling". Proc. IEEE International Advanced Computing Conference, pp. 3406-3411, 6-7 2009.
7. R. Patlak, S. Joshi & P. Sankar. Khosravar. "Multi Scale Modeling of Nano Enable Solar cell With Implementation on an HPC Setup". Proc. Third IEEE International Conference on Power Systems, 978-1-4244-4333-4, 2009.
8. J. L. Guy (2011), "Solar Cells Lecture 2: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11680>
9. Dmitry Vasiltskiy (2011), "SILVACO Simulation of Solar Cells," <https://nanohub.org/resources/10730>
10. Dmitry Vasiltskiy, Gerhard Klumpp (2010), "Solar Cells Operation and Modeling," <https://nanohub.org/resources/9328>

AUTHOR: Caterin Salas Redondo (caterin_salas@ieee.org)

ADVISER: Jose Luis Villa Ramirez (jvilla@unitecnologica.edu.co)
Technological of Bolívar University, Cartagena, Colombia.



UNIVERSIDAD
Tecnológica de Bolívar
CARTAGENA DE INDIAS



5.5 Selección del modelo a reproducir

Redes aleatorias de CNT como electrodo transparente tomado de N. Pimparkar, M. Chowalla, & M. A. Alam. Device optimization for organic photovoltaics with CNT networks as transparent electrode. *Novel Materials and Devices*. 2008. 978-1-4244-1641-7/0. P. 1-4

5.5.1 Hipótesis a demostrar para entender mejor la problemática desde el punto de vista de simulación, energía y control

- La red de nanotubos se simula como una grilla 2D.
- Según el artículo, la clave para obtener mejores resultados en cuanto a transparencia y conductividad del electrodo es controlar la densidad del tubo. A partir de las curvas características, se podrá determinar cual es la densidad límite para obtener dicha optimización.
- En cuanto a energía, si se obtienen las características adecuadas del electrodo, habrá mayor generación de carga, a través de la proporcionalidad adecuada entre transparencia y conductancia de acuerdo a la densidad de la red usada. Al conseguir mayor generación de carga, la probabilidad de tener mayores portadores de carga en la interfaz de la celda aumenta.

5.5.2 Observaciones al modelar

- Nanoestructurar los materiales en forma de nanocables/nanotubos (de unas dimensiones similares a la longitud de difusión de los excitones, 10 nm) sobre el sustrato es crucial para garantizar un transporte efectivo de carga.
- La longitud de difusión de los excitones debe ser grande, con el fin de incrementar el volumen activo para la disociación eficiente de excitones. El tiempo de vida de los portadores de carga debe ser mas grande que el tiempo de transito, y las características de transporte de los portadores de carga deben estar balanceadas, en pro de prevenir el efecto de la carga espacial. [47]

- La corta longitud de difusión de los excitones constituye uno de los obstáculos para una alta eficiencia en las células solares orgánicas (OSC). Típicamente, esta longitud de difusión es varias veces más corta que la longitud de absorción de la mayoría de los materiales utilizados en las células fotovoltaicas orgánicas. Recientemente, se propuso el uso de una cavidad óptica para aumentar dicha longitud de difusión. [48]
- Se tiene un exceso de la concentración de portadores mayor que la concentración de equilibrio, por lo que hay una difusión a través del material a lo largo de la longitud de difusión de electrones (L_n) y huecos (L_p) para finalmente y de acuerdo al mecanismo predominante recombinarse. [49]

5.5.3 Herramienta computacional seleccionada

El software de simulación a utilizar es COMSOL Multiphysics, el cual se seleccionó por la metodología de simulación (método de elementos finitos), permite modelamiento orientado a objetos (modelamiento acausal) y los recursos al alcance, el cual puede operar sobre un servidor de buena arquitectura computacional o sobre una máquina con requerimientos mínimos al alcance de un computador personal. Dicha herramienta está disponible en la Universidad de los Andes para la continuación de la implementación y optimización del modelo.

5.6 Reproducción del modelo y simulación del electrodo transparente en una celda solar orgánica.

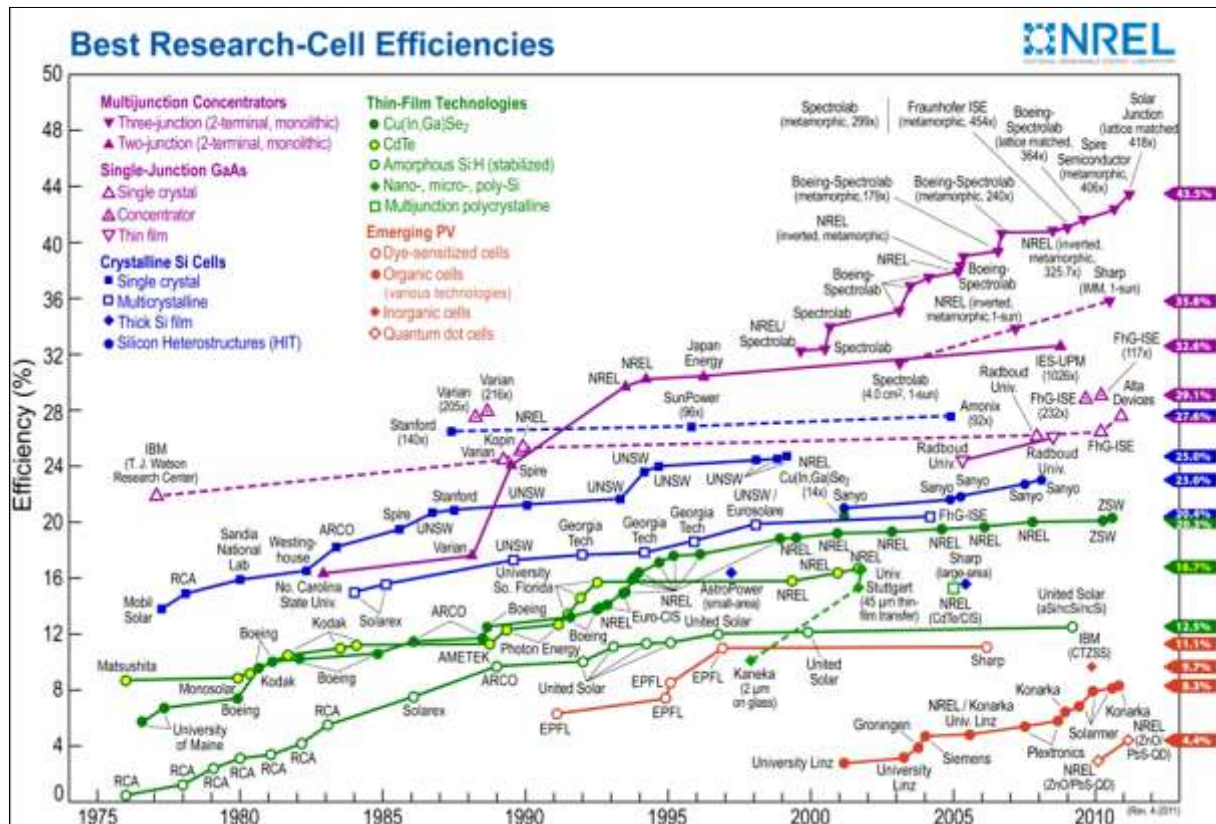
5.6.1 Modelamiento del Electrodo Transparente

a. Descripción del modelo

Se propone el modelado del electrodo transparente de una celda solar orgánica, con el fin de plantear viabilidades para aumentar la eficiencia a partir de la optimización de los parámetros que abordan dicho electrodo. Según la Ilustración 34, entre los tipos de celdas solares graficadas, los mejores resultados obtenidos a partir de las orgánicas, se observa que a fines del 2010 la mayor eficiencia fue de 8,3% (Konarka Technologies Inc.) y de 20,3%

en celdas de películas delgadas “CIGS” (Centre for Solar Energy and Hydrogen Research, ZSW).

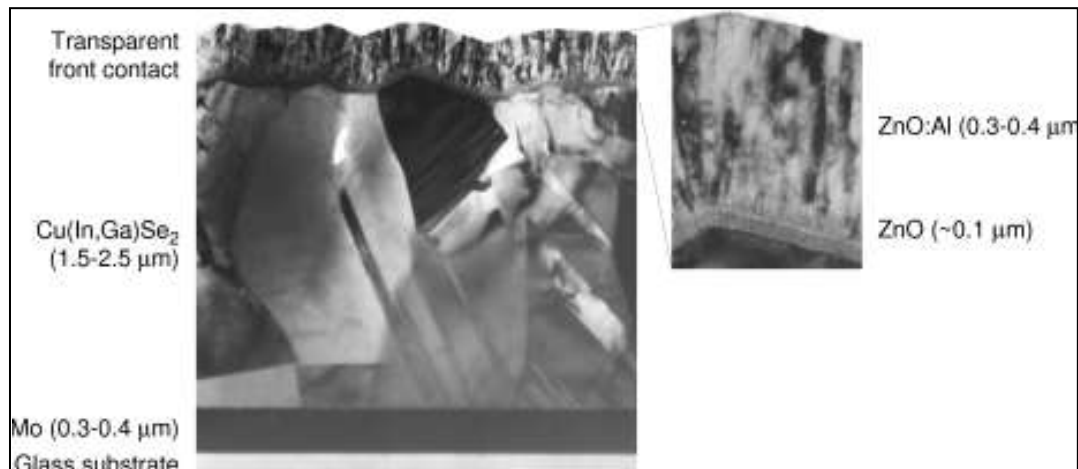
Ilustración 34. Mejores resultados de investigación de eficiencias de celdas solares



Fuente: National Renewable Energy Laboratory

Teniendo en cuenta lo anterior, se selecciona el tipo de celda solar orgánica con tecnología de películas delgadas CIGS (Ver ilustración 35). Este tipo de celda consta de una capa delgada de óxido de zinc de alta resistencia (ZnO) y un contacto frontal transparente de aluminio dopado con óxido de zinc (ZnO:Al). La luz es absorbida en la celda solar y la corriente que se genera es dominada por la ecuación del diodo. Dicha absorción de luz se realiza en el contacto frontal transparente que conduce a pérdidas ópticas, por tal motivo es de vital importancia lograr la mayor transmisión de luz en esta etapa del proceso de generación de luz de las celdas solares.

Ilustración 35. Micrografía electrónica de transmisión de las capas en una celda solar CIGS.



Fuente: Joar Johansson. Modelling and Optimization of CIGS Solar Cell Modules. Master's Thesis. Department of Energy and Building Design and Department of Architecture and Built Environment. Lund University. 2007

El modelo del electrodo está basado en el modelo de un diodo y tiene en cuenta los parámetros eléctricos, ópticos y geométricos. El modelo se implementa en COMSOL Multiphysics TM versión 4.2a, que resuelve el problema utilizando el método de elementos finitos.

En el modelo gráfico con geometría 2D se definen dos dominios los cuales representan las capas del electrodo transparente de una celda CIGS y en cada dominio a su vez, se especifican los materiales de cada capa, tal y como se observa en la Ilustración 35. Dicho modelo se implementa usando los módulos de Transferencia de Calor en Sólidos (Heat Transfer in solids) y Corrientes Eléctricas (Electric fields). Al definir estas dos características (geometría y físicas que controlen el estudio) se establecen las condiciones de frontera:

- Potencial Eléctrico en el límite Derecho: $V=V_{cell}$
- Potencial Eléctrico en el límite Izquierdo: $V_0=0$
- Aislamiento eléctrico (especifica que no fluye corriente a través de cualquiera de los límites exteriores): $n \cdot J = 0$
- Continuidad (especifica que las componentes normales de la corriente eléctrica son continuas a través del límite interior): $n \cdot (J_1 - J_2) = 0$

- Temperatura en el límite superior: Temperatura ambiente.
- Temperatura en el límite inferior:
- Insolación térmica

La conductividad de los materiales, constantes y expresiones para la corriente generada, están delimitados por la ecuación 25 (densidad de corriente total), ecuación 26 (densidad de corriente de saturación), ecuación 27 (densidad de corriente de corriente generada por luz). Además, la expresión que describe la transmisión de la luz incidente, también se establece en la ecuación 28.

$$J_i = J_0 e^{\frac{qV_i}{AkT}} - J_L \text{ Ecuación 25}$$

$$J_0 = J_{00} e^{-\frac{E_g}{AkT}} \text{ Ecuación 26}$$

$$J_L = T_{ZnO:Al} J_{L,in} \text{ Ecuación 27}$$

$$T_{ZnO:Al} = T_1 - \left(\frac{R_1}{R_{ZnO:Al}} \right)^{m_1} \text{ Ecuación 28}$$

El software aplica automáticamente una malla a la geometría, al establecer el control del enmallado a las físicas que abordan el estudio y finalmente el tamaño de la malla es predefinido. Luego viene la etapa de solución donde el software incluye un conjunto de resolvedores numéricos.

En este caso, se seleccionó el solucionador no lineal paramétrico y la compilación del conjunto de ecuaciones se realiza en el dominio del tiempo. Dichas ecuaciones son derivadas parciales que representan a todo el modelo y resuelve el problema. El modelo se resuelve para el potencial, V_{cell} , en el intervalo de 0V a 0.7V y cada voltaje dará una densidad de corriente de salida, J y esta a su vez disminuye a medida que el espesor de la capa de ZnO:Al se incrementa debido a la mayor absorción óptica de la luz en una capa más gruesa.

b. Variables que Controlan la Física del Modelo

Temperatura y Potencial Eléctrico

c. Parámetros de Entrada

Los parámetros de entrada del modelo son detallados en la tabla 10.

Tabla 10. Parámetros de Entrada

Descripción	Variable	Valor	Unidad
Espesor ZnO:Al	d	0,3 a 0,7	μm
Espesor ZnO	ZnO	0,1	μm
Conductividad ZnO:Al	$\sigma_{\text{ZnO:Al}}$	4,50E+04 a 1,1E+05	S/m
Band gap	E_g	1,2	eV ó J
Factor de idealidad	A	1,245	
Temperatura	T	298	K
Temperatura ambiente	T_{amb}	318,16	K
Irradiancia	P_{in}	1000	W/m ²
Corriente generada por luz incidente	$J_{\text{L,in}}$	350	A/m ²
Carga elementaria	q	1,60E-19	C
Constante de Boltzman	B	8,62E-15	eV/K ó J/K
Coeficiente de absorción	κ_R	0,001	
Emisividad superficial ZnO:Al	ε	0,53	
Permitividad Relativa ZnO:Al	ϵ	8,5	
Prefactor	J_{oo}	1,10E+10	A/m ²

d. Parámetros de salida

Los parámetros de salida del modelo son detallados en la tabla 11.

Tabla 11. Parámetros de Salida

Descripción	Variable	Valor	Unidad
Resistencia laminar ZnO:Al	$R_{\text{ZnO:Al}}$	Ecuación 30	Ω
Corriente de saturacion	J_0	Ecuacion 26	A/m ²
Corriente generada por luz	J_L	Ecuacion 27	A/m ²
Transmitancia ZnO:Al	$T_{\text{ZnO:Al}}$	Ecuación 28	
Densidad de corriente total	J	Ecuación 25	A/m ²

Cabe anotar que las variables de Densidad de corriente se calculan sobre todas las capas de materiales del modelo, es decir, sobre la capa superior ZnO:Al y la capa inferior o buffer ZnO.

Resistencia de la lámina:

Es una medida de la resistencia eléctrica de las películas delgadas que tienen un espesor uniforme, d . Se expresa normalmente en unidades de Ω/m^2 y se mide experimentalmente usando una sonda de cuatro puntos y el espesor se puede medir utilizando un perfilómetro.

$$R = \frac{\rho}{d} = \frac{1}{d\sigma} \text{Ecuación 29}$$

La siguiente relación es válida para la resistencia de la lamina, la conductividad y el espesor de la capa de ZnO:Al

$$R_{\text{ZnO:Al}} = \frac{1}{d\sigma_{\text{ZnO:Al}}} \text{Ecuación 30}$$

Los datos experimentales de la resistencia laminar y el espesor de la capa de ZnO:Al se puede ver en la Tabla 12 y a partir de estos datos se calcula la conductividad, cuyos valores resultantes también se muestran en la Tabla 12. Es evidente que la conductividad aumenta a medida que aumenta el espesor.

Tabla 12. Resultados experimentales de la resistencia laminar y espesor de la capa ZnO:Al

Sub. No. CIGS	J_{SC} [mA/cm ²]	Sub. No	$R_{\text{ZnO:Al}}$ [Ω]	d [μm]	$\sigma_{\text{ZnO:Al}}$
		glass			[S/m]
3074-3838-04	33,6	4141-2	28	0,56	6,40E+04
3080-3838-12	31,6	4141-1	11	1,1	8,30E+04
3073-3838-05	30,3	4147-2	7,2	1,5	9,30E+04
3076-3838-04	29,3	4141-5	5,3	1,9	9,90E+04
3078-3838-05	26,9	4142-1	3,4	2,7	1,10E+05
3075-3838-12	24,4	4142-2	2,3	3,3	1,30E+05

Fuente: UPPA University

Transmisión de luz:

La transmisión óptica de la luz incidente a través del contacto frontal transparente disminuye repentinamente cuando la capa de ZnO:Al se vuelve más gruesa y tiene como

resultado una menor resistencia laminar. El modelo que describe esta propiedad es descrito en la ecuación W.

$$T_{ZnO:Al} = T_1 - \left(\frac{R_1}{R_{ZnO:Al}} \right)^{m_1} \text{Ecuación 31}$$

Donde T_1 , R_1 y m_1 son constantes ajustadas para adaptarse a los datos experimentales. Para garantizar la simplicidad del estudio de la transmisión de la luz se supone que este parámetro es independiente de la longitud de onda de la luz incidente.

Se han realizado experimentos para determinar la transmisión a través de la capa de ZnO:Al como una función de su resistencia laminar en Solarex Corporación y en la Universidad de Uppsala, de donde se establecen los parámetros de ajuste:

$$T_1 = 1$$

$$R_1 = 0,3707 \, \Omega/m^2$$

$$m_1 = 0,8226$$

Entonces finalmente la ecuación de transmitancia resulta siendo:

$$T_{ZnO:Al} = 1 - \left(\frac{0,3707}{R_{ZnO:Al}} \right)^{0,8226} \text{Ecuación 32}$$

Si se desea tener en cuenta la longitud de onda de la luz incidente para calcular la transmitancia, entonces la expresión que modela este comportamiento es la ley exponencial de Beer-Lambert:

$$T(\lambda) = e^{-\alpha(\lambda)d} \text{Ecuación 33}$$

Donde $\alpha(\lambda)$ es el coeficiente de atenuación y d es la longitud de trayecto.

e. Implementación del Modelo Numérico en Comsol

La implementación del modelo en el software de simulación COMSOL MULTYPHISICS se ejecutó bajo las licencias:

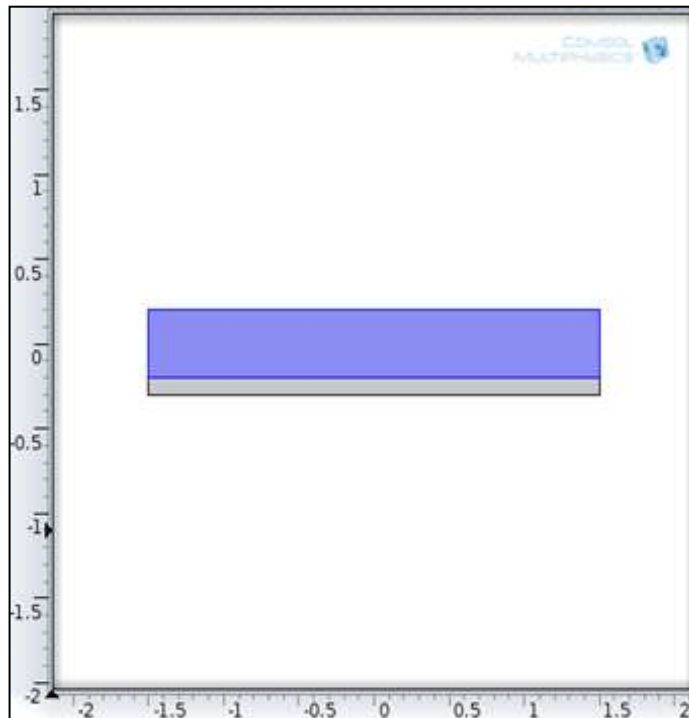
Tabla 13. Licencias de acceso a Comsol Multiphysics usadas en la simulación

Trial pass code (Windows):	9FFFBFF8-TYUS-120223-2076343-296193997	9FFFBFF8-TYUS-120202-2076231-294726469	9FFFBFF8-TYUS-111227-2076067-297280314
License Number:	2076343	2076231	2076067
Expiration date:	February 23th, 2012	February 2th, 2012	December 27th, 2011

Primeramente, se define la geometría del modelo grafico, en este caso es 2D y consta de dos capas de materiales sólidos semiconductores.

La Ilustración 36, muestra el dominio donde se a definido el material para la capa superior del electrodo: ZnO:Al Solido (Recuadro de color azul).

Ilustración 36. Selección de dominio para la capa con material ZnO:Al



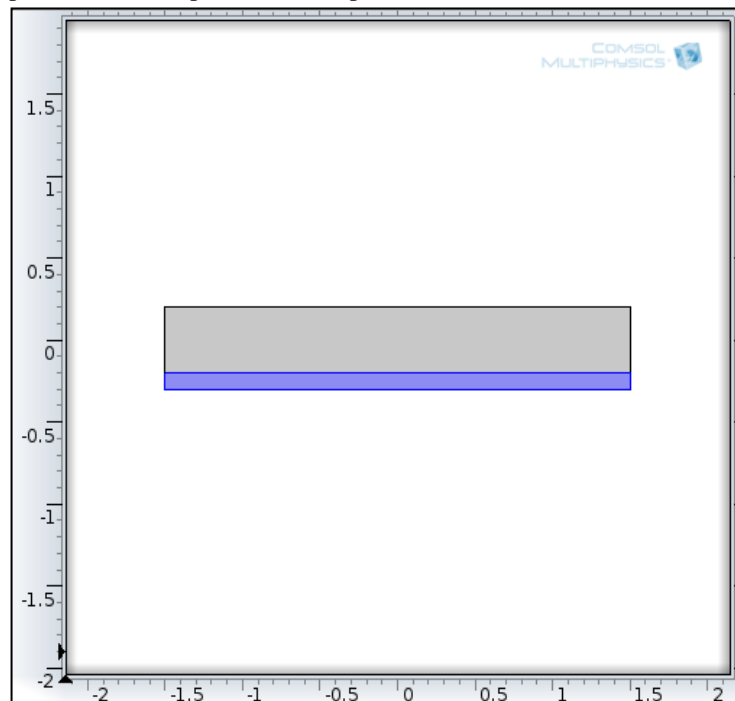
En la tabla 14, se denotan las propiedades básicas establecidas para este material:

Tabla 14. Propiedades principales de la capa del material ZnO:Al

Descripción	Variable	Valor	Unidad
Espesor	d	0,3 a 0,7	μm
Conductividad eléctrica	$\sigma_{\text{ZnO:Al}}$	4,5E+04 a 1,1E+05	S/m
Resistencia laminar	$R_{\text{ZnO:Al}}$	Ecuación 30	$\Omega. \text{m}$
Emisividad superficial	ε	0,53	
Permitividad Relativa	e	8,6	
Capacidad de calor	Cp		
Conductividad térmica	k		
Coefficiente de Absorción	κ_R	0,001	
Transmitancia	$T_{\text{Zno:Al}}$	Ecuación 32	

La Ilustración 37, muestra el dominio donde se ha definido el material para la capa que actúa como buffer en el electrodo: ZnO solido policristalino (Recuadro de color azul).

Ilustración 37. Propiedades de la capa ZnO solido policristalino

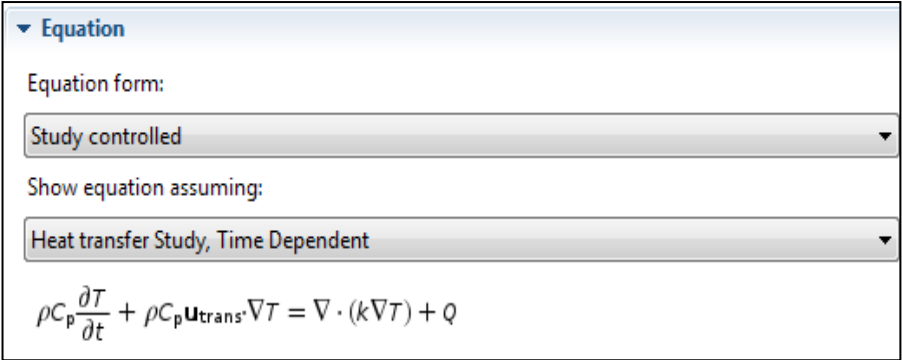


Sobre este material, dado que no es compuesto, Comsol Multiphysics tiene predefinidas propiedades para este material, el cual está inmerso en la librería del simulador, por lo que en este modelo no se modificaron los valores de dichas propiedades.

El siguiente paso es definir las físicas que abordan el estudio, es decir, a partir de esta selección, se plantearán las ecuaciones generales que deberá resolver el simulador. En este caso se seleccionaron las físicas de Transferencia de calor en sólidos y Corrientes eléctricas.

En la Ilustración 38 se observa la ecuación general de la física TRANSFERENCIA DE CALOR EN SOLIDOS y en la Ilustración 39 la ecuación general de la física ELECTRICA. Estas ecuaciones son definidas por la física y en este caso se ha escogido la representación en el dominio del tiempo.

Ilustración 38. Ecuación general de la física TRANSFERENCIA DE CALOR EN SOLIDOS

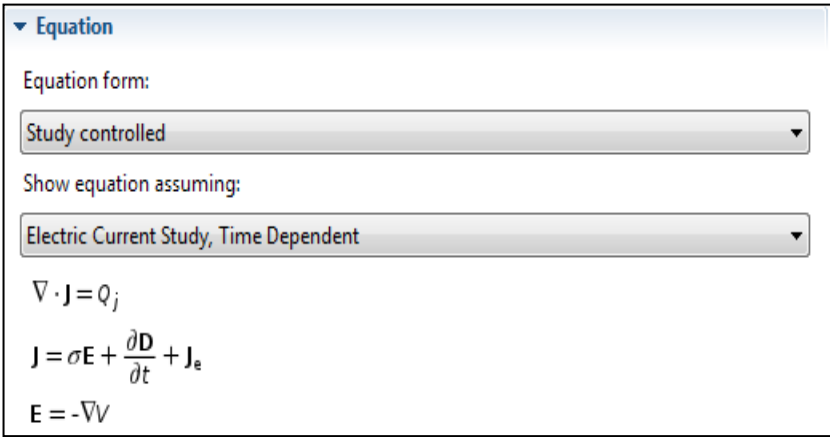


Equation form:
Study controlled

Show equation assuming:
Heat transfer Study, Time Dependent

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u}_{trans} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q$$

Ilustración 39. Potencial Eléctrico: Ecuaciones generales de la física ELECTRICA



Equation form:
Study controlled

Show equation assuming:
Electric Current Study, Time Dependent

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = Q_j$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_e$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V$$

Las siguientes ilustraciones muestran el método de discretización seleccionado y las variables dependientes definidas por la física seleccionada:

Ilustración 40. Transferencia de calor en sólidos: Discretización

▼ **Discretization**

Temperature:

Surface radiosity:

Radiative intensity:

— Value types when using splitting of complex variables —

Dependent variable	Value type
Temperature	Complex ▼
Surface radiosity	Complex ▼
Radiative intensity	Complex ▼

Ilustración 41. Transferencia de calor en sólidos: Variables dependientes

▼ **Dependent Variables**

Temperature:

Surface radiosity:

Discrete ordinates method:

Radiative intensities:

Ilustración 42. Discretización y Variables dependientes en la física ELECTRICA

▼ **Discretization**

Electric potential:

Value type when using splitting of complex variables:

▼ **Dependent Variables**

Electric potential:

En las ilustraciones 43 y 44 se observan las condiciones de entrada, conducción térmica y termodinámica del estudio en la física de TRANSFERENCIA DE CALOR EN SOLIDOS y en la ilustración 45 y 46 se muestran las Condiciones de entrada, conducción de corriente y potencial eléctrico del estudio en la física ELECTRICA.

Ilustración 43. Entradas del modelo delimitadas desde la física Transferencia de Calor en sólidos

Model Inputs

Temperature:
 T Temperature (ht/solid1)

Electric field:
 E User defined

0	x	V/m
0.7	y	

Strain reference temperature:
 T_{ref} User defined

318.16 K

Ilustración 44. Condiciones de conducción de calor y termodinámica delimitadas por la física Transferencia de Calor en sólidos

Heat Conduction

Thermal conductivity:
 k From material

Thermodynamics

Density:
 ρ From material

Heat capacity at constant pressure:
 C_p From material

Ilustración 45. Potencial Eléctrico: Condiciones de entrada, conducción de corriente y potencial eléctrico

Model Inputs

Temperature:
 T Temperature (ht/solid1)

Electric field:
 E Electric field (ec/cucn1)

Strain reference temperature:
 T_{ref} User defined
 318.16 K

Ilustración 46. Potencial Eléctrico: Conducción de corriente y potencial eléctrico

Conduction Current

Electrical conductivity:
 σ From material

Electric Field

Constitutive relation:
 Relative permittivity
 $D = \epsilon_0 \epsilon_r E$

Relative permittivity:
 ϵ_r From material

Teniendo en cuenta lo expuesto al inicio de este capítulo, una de las condiciones de frontera es la Aislamiento térmica y eléctrica. La manera como se define esta condición en Comsol es observa en la ilustración 47 para el estudio de transferencias de calor en sólidos y en la ilustración 49 para el estudio de corrientes eléctricas. La representación grafica de estas condiciones de frontera se observan en las ilustraciones 48 y 50 respectivamente.

Ilustración 47. Transferencia de calor en sólidos: Aislamiento térmico

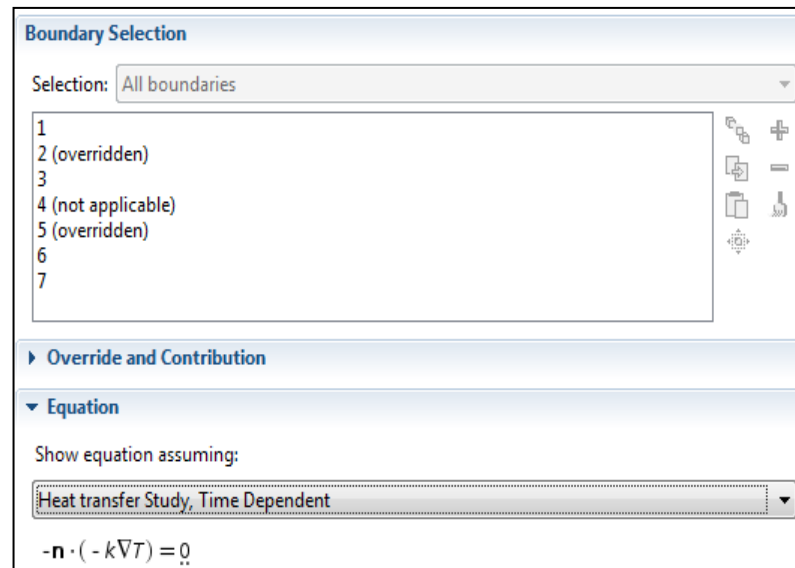


Ilustración 48. Definición de fronteras para la Aislamiento térmico

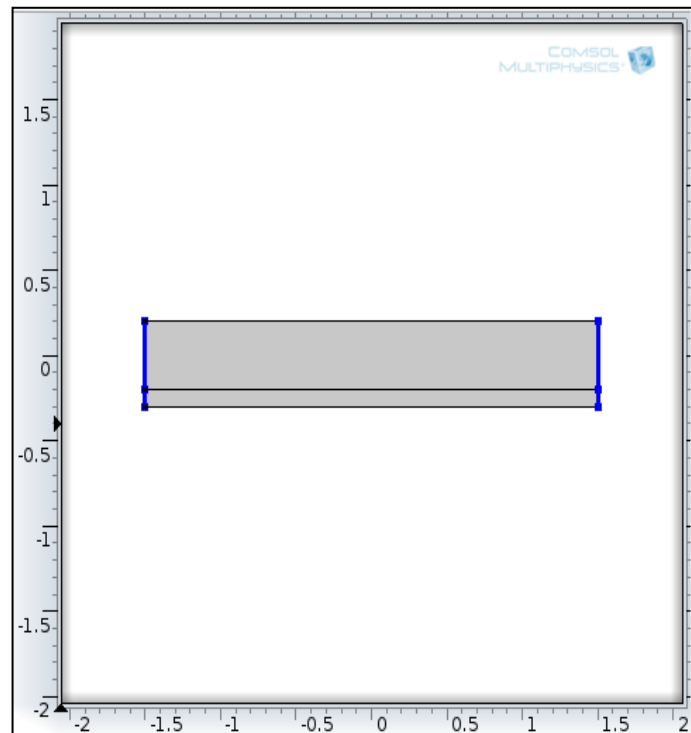


Ilustración 49. Potencial eléctrico: Aislamiento eléctrico

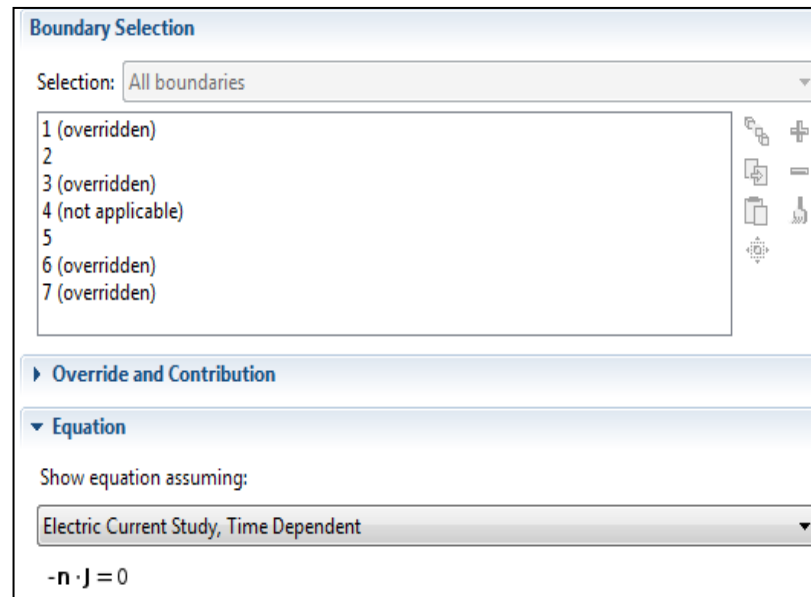
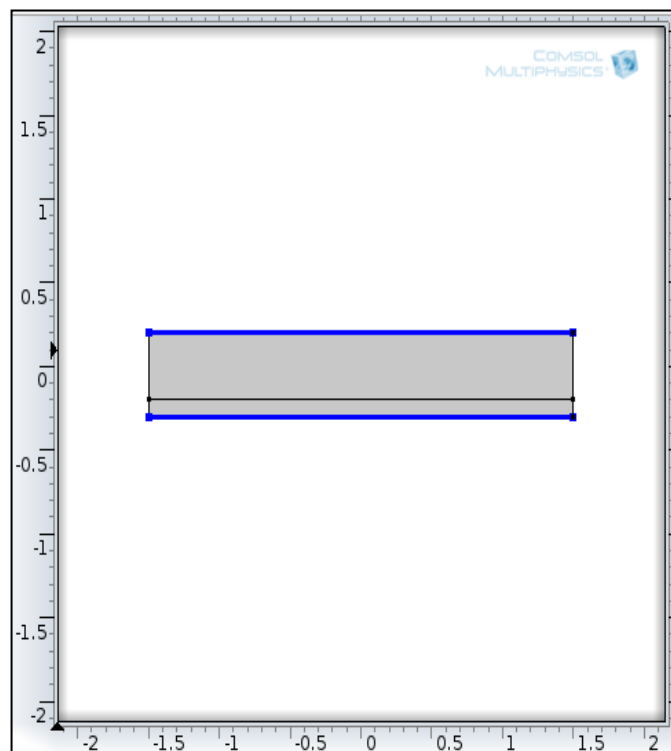


Ilustración 50. Definición de fronteras para el Aislamiento eléctrico



Dentro de las condiciones de frontera, se define además, la exposición de la capa superficial a la radiación ambiental y la aplicación de un potencial eléctrico inicial. Lo anterior se observa en las Ilustraciones 51 y 53 respectivamente. La representación grafica de estas condiciones de frontera se observan en las ilustraciones 52 y 54.

Ilustración 51. Transferencia de Calor en sólidos: Superficie expuesta a la radiación ambiental

Equation

Show equation assuming:

Heat transfer Study, Time Dependent

$$-\mathbf{n} \cdot (-k \nabla T) = \epsilon \sigma (T_{\text{amb}}^4 - T^4)$$

Model Inputs

Temperature:

T

Temperature (ht/solid1)

Electric field:

E

User defined

0

x

0.7

y

V/m

Strain reference temperature:

T_{ref}

User defined

0

K

Surface-to-Ambient Radiation

Surface emissivity:

ε

From material

Ambient temperature:

T_{amb}

318.16

K

Variables

Name	Expression	Unit	Description
ht.rflux	-ht.epsilon_rad*sigma_const*(ht.Tamb^4-ht.T^4)	W/m²	Radiative heat
ht.epsilon_rad	material.parameter.epsilon_rad	1	Surface emissi
ht.Tamb	318.16	K	Ambient temp
ht.T	model.input.minput_temperature	K	Temperature

Ilustración 52. Definición de fronteras para la condición de exposición a la radiación ambiental

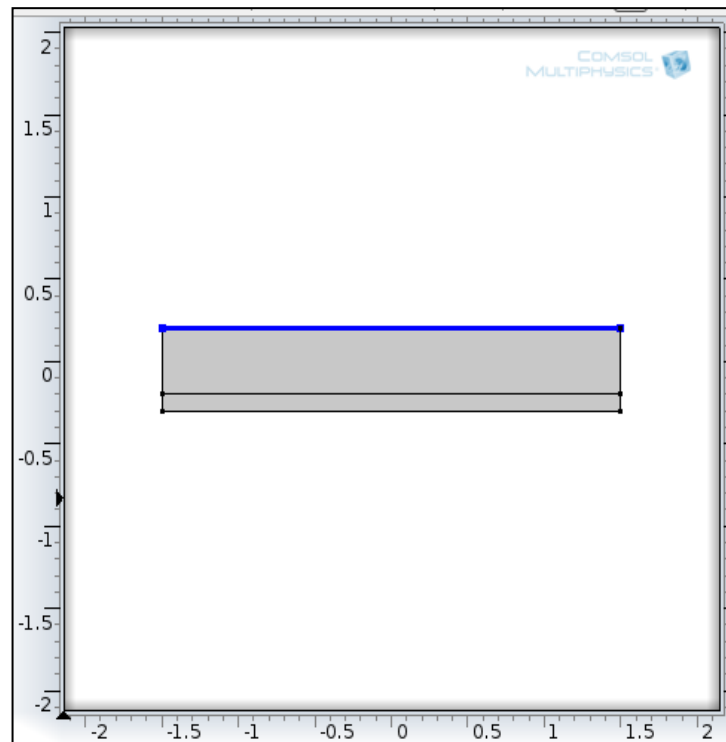
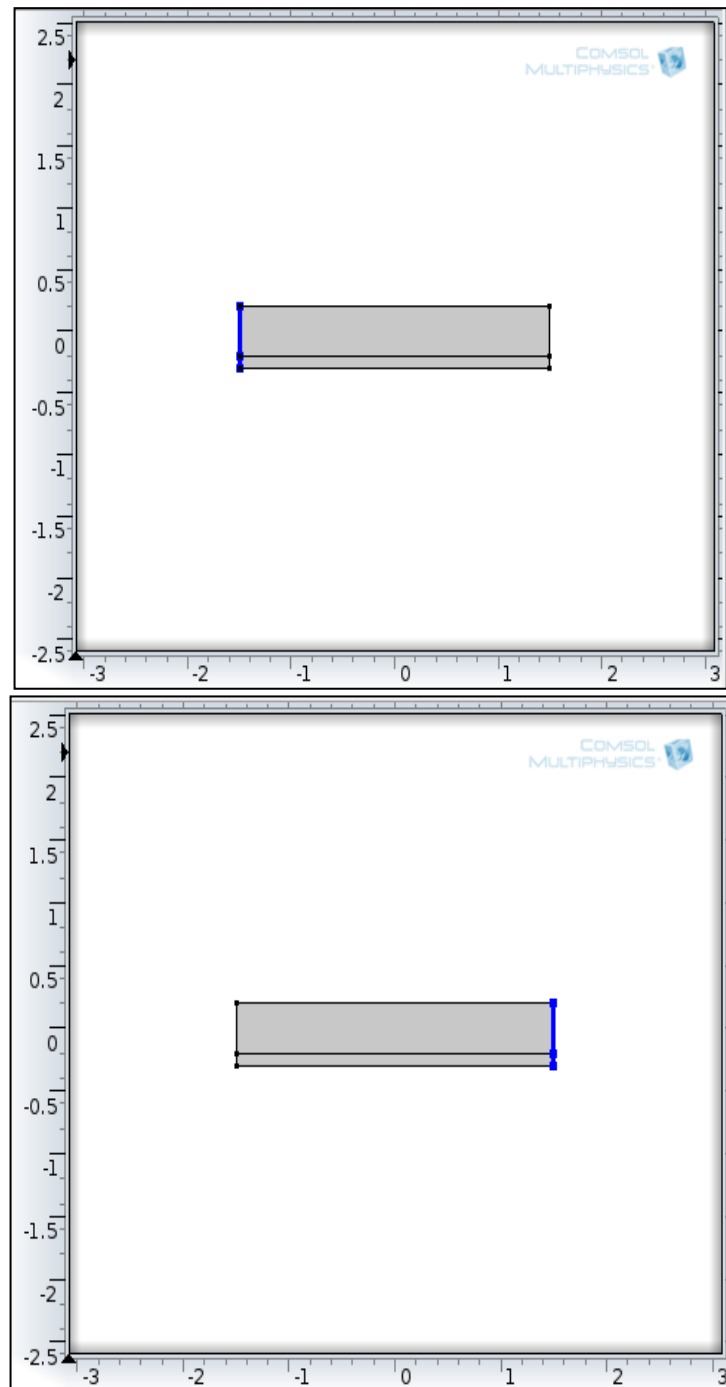


Ilustración 53. Potencial eléctrico: Condiciones iniciales

Variables				
	Name	Expression	Unit	Description
	ec.nJ	$unx \cdot (\text{down}(ec.Jx) - \text{up}(ec.Jx)) + uny \dots$	A/m ²	Inward current dens...
	ec.V0	0.7	V	Electric potential
	ec.V0	12	V	Electric potential

Ilustración 54. Definición de fronteras para la condición de aplicación de potencial eléctrico



Finalmente, se selecciona el tipo de enmallado que delimitará la división del modelo grafico (plano 2D) en elementos finitos. La configuración realizada en el simulador se observa en la ilustración 55. La representación grafica del enmallado aplicado al modelo se observa en la Ilustración 56.

Ilustración 55. Configuración del enmallado

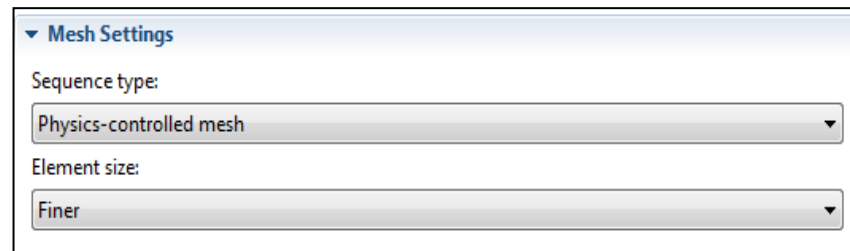
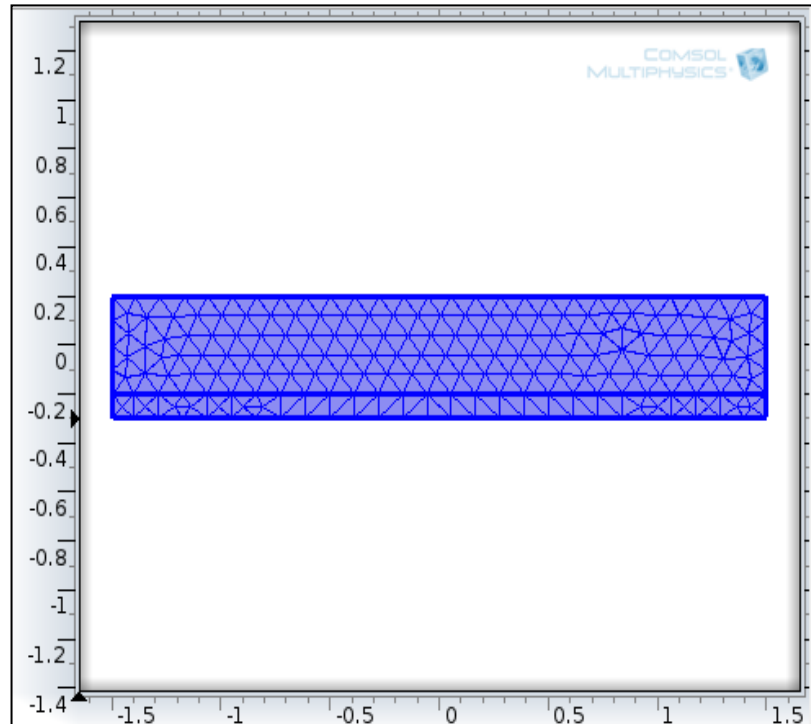


Ilustración 56. Enmallado



f. Resultados de simulación

En las ilustraciones 57 y 58 se muestra el comportamiento ideal de la distribución de potencial y temperatura en el electrodo los cuales varían gracias a los gradientes de temperatura y potencial, aplicados sobre el modelo.

Ilustración 57. Distribución del potencial eléctrico en el electrodo

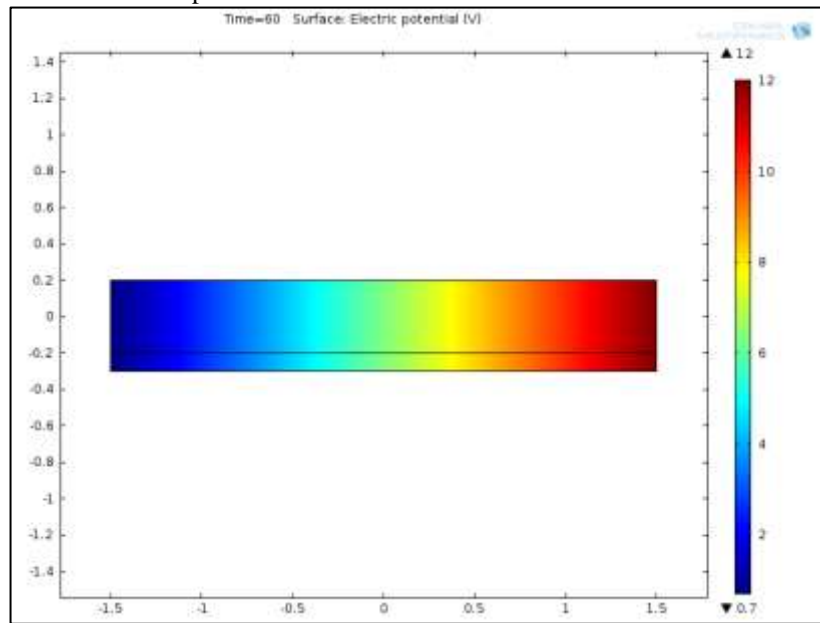
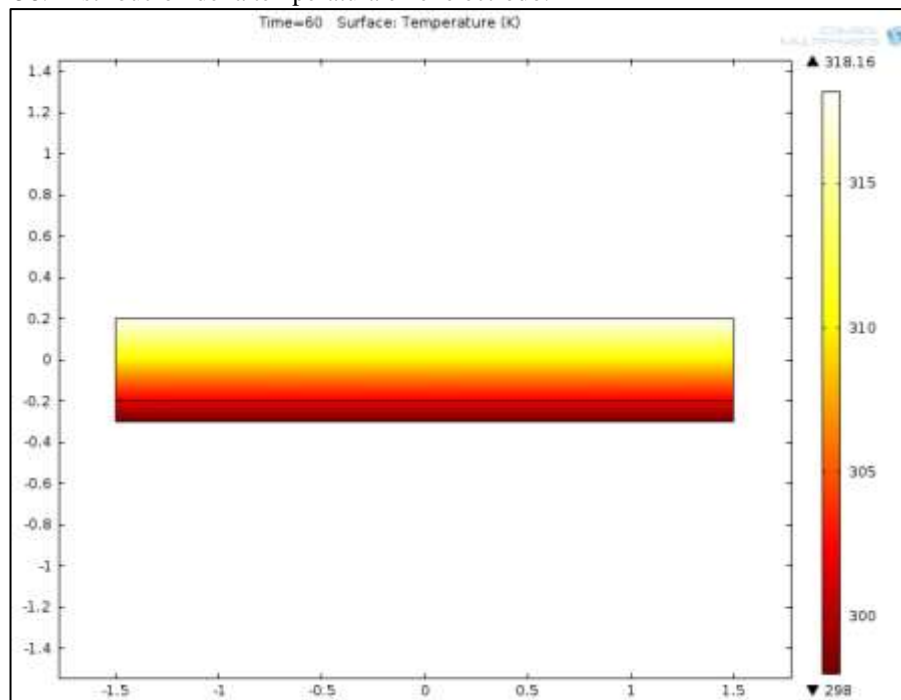


Ilustración 58. Distribución de la temperatura en el electrodo.



En las tablas se agrupan los resultados ideales obtenidos sobre el electrodo variando el parámetro de la densidad, conductividad de la capa ZnO:Al de la celda organica del tipo CIGS y el voltaje aplicado sobre la celda. El rango de variación fue establecido por valores experimentales tomados de Uppa University (Tabla 12 de este documento).

Tabla 15. Resultados para espesor de la capa ZnO:Al con espesor de 3um

sigma	res	Trans	JL	J	V
47500	7,01754386	0,93	350	5,06189E-06	0,461538462
50000	6,666666667	0,93	350	5,06189E-06	0,923076923
52500	6,349206349	0,93	350	5,06189E-06	1,384615385
55000	6,060606061	0,93	350	5,06189E-06	1,846153846
57500	5,797101449	0,93	350	5,06189E-06	2,307692308
60000	5,555555556	0,93	350	5,06189E-06	2,769230769
62500	5,333333333	0,93	350	5,06189E-06	3,230769231
65000	5,128205128	0,93	350	5,06189E-06	3,692307692
67500	4,938271605	0,93	350	5,06189E-06	4,153846154
70000	4,761904762	0,93	350	5,06189E-06	4,615384615
72500	4,597701149	0,93	350	5,06189E-06	5,076923077
80000	4,166666667	0,93	350	5,06189E-06	6,461538462
82500	4,04040404	0,93	350	5,06189E-06	6,923076923
85000	3,921568627	0,93	350	5,06189E-06	7,384615385
87500	3,80952381	0,93	350	5,06189E-06	7,846153846
90000	3,703703704	0,93	350	5,06189E-06	8,307692308
92500	3,603603604	0,93	350	5,06189E-06	8,769230769
95000	3,50877193	0,93	350	5,06189E-06	9,230769231
97500	3,418803419	0,93	350	5,06189E-06	9,692307692
100000	3,333333333	0,93	350	5,06189E-06	10,15384615
102500	3,25203252	0,93	350	5,06189E-06	10,61538462
105000	3,174603175	0,93	350	5,06189E-06	11,07692308
107500	3,100775194	0,93	350	5,06189E-06	11,53846154
110000	3,03030303	0,93	350	5,06189E-06	12

Fuente: Datos extraídos del modelo realizado en Comsol Multiphysics

Tabla 16. Resultados para espesor de la capa ZnO:Al con espesor de 2um

sigma	res	trans	JL	J	V
47500	10,52631579	0,96	350	5,06189E-06	0,461538462
50000	10	0,96	350	5,06189E-06	0,923076923
52500	9,523809524	0,96	350	5,06189E-06	1,384615385
55000	9,090909091	0,96	350	5,06189E-06	1,846153846
57500	8,695652174	0,96	350	5,06189E-06	2,307692308
60000	8,333333333	0,96	350	5,06189E-06	2,769230769
62500	8	0,96	350	5,06189E-06	3,230769231
65000	7,692307692	0,96	350	5,06189E-06	3,692307692
67500	7,407407407	0,96	350	5,06189E-06	4,153846154
70000	7,142857143	0,96	350	5,06189E-06	4,615384615
72500	6,896551724	0,96	350	5,06189E-06	5,076923077
80000	6,25	0,96	350	5,06189E-06	6,461538462
82500	6,060606061	0,96	350	5,06189E-06	6,923076923
85000	5,882352941	0,96	350	5,06189E-06	7,384615385
87500	5,714285714	0,96	350	5,06189E-06	7,846153846
90000	5,555555556	0,96	350	5,06189E-06	8,307692308
92500	5,405405405	0,96	350	5,06189E-06	8,769230769
95000	5,263157895	0,96	350	5,06189E-06	9,230769231
97500	5,128205128	0,96	350	5,06189E-06	9,692307692
100000	5	0,96	350	5,06189E-06	10,15384615
102500	4,87804878	0,96	350	5,06189E-06	10,61538462
105000	4,761904762	0,96	350	5,06189E-06	11,07692308
107500	4,651162791	0,96	350	5,06189E-06	11,53846154
110000	4,545454545	0,96	350	5,06189E-06	12

Fuente: Datos extraídos del modelo realizado en Comsol Multiphysics

Tabla 17. Resultados para espesor de la capa ZnO:Al con espesor de 0.4 μm

sigma	res	trans	JL	J	V
47500	52,63157895	0,98	350	5,06189E-06	0,461538462
50000	50	0,98	350	5,06189E-06	0,923076923
52500	47,61904762	0,98	350	5,06189E-06	1,384615385
55000	45,45454545	0,98	350	5,06189E-06	1,846153846
57500	43,47826087	0,98	350	5,06189E-06	2,307692308
60000	41,66666667	0,98	350	5,06189E-06	2,769230769
62500	40	0,98	350	5,06189E-06	3,230769231
65000	38,46153846	0,98	350	5,06189E-06	3,692307692
67500	37,03703704	0,98	350	5,06189E-06	4,153846154
70000	35,71428571	0,98	350	5,06189E-06	4,615384615
72500	34,48275862	0,98	350	5,06189E-06	5,076923077
80000	31,25	0,98	350	5,06189E-06	6,461538462
82500	30,3030303	0,98	350	5,06189E-06	6,923076923
85000	29,41176471	0,98	350	5,06189E-06	7,384615385
87500	28,57142857	0,98	350	5,06189E-06	7,846153846
90000	27,77777778	0,98	350	5,06189E-06	8,307692308
92500	27,02702703	0,98	350	5,06189E-06	8,769230769
95000	26,31578947	0,98	350	5,06189E-06	9,230769231
97500	25,64102564	0,98	350	5,06189E-06	9,692307692
100000	25	0,98	350	5,06189E-06	10,15384615
102500	24,3902439	0,98	350	5,06189E-06	10,61538462
105000	23,80952381	0,98	350	5,06189E-06	11,07692308
107500	23,25581395	0,98	350	5,06189E-06	11,53846154
110000	22,72727273	0,98	350	5,06189E-06	12

Fuente: Datos extraídos del modelo realizado en Comsol Multiphysics

Los resultados agrupados en las tablas 15 a la 17 muestran que para la misma variación de conductividad del electrodo y voltaje aplicado, se observa una variación de la resistencia laminar de $22,72\Omega$ a $52,63\Omega$ (15% de variación) en el electrodo con un espesor de $0,4\mu\text{m}$; de $10,52\Omega$ a $4,54\Omega$ (3% de variación) en el electrodo con un espesor de $2\mu\text{m}$ y de 7Ω a 3Ω (2% de variación) en el electrodo con un espesor de $3\mu\text{m}$. Idealmente la transmitancia del electrodo es de aproximadamente 96%, la cual se mantiene durante la variación de la resistencia laminar.

Haciendo una relación, entre la variación de la resistencia laminar y la transmitancia del electrodo, se deduce que el espesor ideal para un electrodo de este tipo es de $2\mu\text{m}$, el cual con una variación de 2% en su resistencia laminar mientras aumentaba la conductancia del material, obtuvo una transmitancia del 98%.

g. Análisis

El modelado realizado será estructuralmente aplicado en el modelado de electrodos con nanotubos de carbono. Para ese punto se deberá incluir la TEORIA DE PERCOLACIÓN, con la cual se modelará la red de nanotubos de carbono finitos aleatoriamente dispersados en el área del electrodo. Este, se basará en el modelamiento planteado en el trabajo de investigación “Percolating Conduction in Finite Nanotube Networks” expuesto por los ingenieros S. Kumar, J.Y. Murthy y M. A. Alam de la Universidad de Purdue (Estados Unidos) en la publicación realizada en la revista PHYSICAL REVIEW LETTERS en el 2005.

Los resultados obtenidos hasta el momento, serán punto de partida para la comparación teórica de un electrodo con material orgánico ZnO:Al, en contraste con uno de material nanoestructurado.

6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

- Se puede controlar la resistencia del electrodo mientras mantiene su transparencia, el control de la resistencia es lo que permite que sea flexible y resistente a la tracción ante cualquier tensión y sometimiento a cambios de ambientes.
- Al mantener la resistencia relativamente constante, dará una conducción constante, por la relación entre densidad de carga y la resistencia.
- Con un electrodo de espesor de 2μ se obtiene mejor transparencia óptica el cual con una variación de 2% en su resistencia laminar mientras aumentaba la conductancia del material, obtuvo una transmitancia del 98%.
- Optimización del modelo utilizando las redes de nanotubos de carbono aleatorios como electrodo transparente, aplicando la teoría de percolación para obtener la distribución aleatoria en la red de nanotubos.
- Conseguir el modelo de la celda completa a través del desarrollo del proyecto de investigación planteado a Colciencias.
 - Obtener la Eficiencia Cuántica, QE , (número de pares electrón-hueco generados por fotón incidente en la celda solar).
 - Realizar la medición para longitudes de onda, λ , en el intervalo de 300 nm a 1300nm.
 - Al conseguir los dos parámetros descritos anteriormente, calcular la densidad de corriente a partir de la expresión: $J_{SC} = \int_0^{\infty} EQE(\lambda)\phi(\lambda)d(\lambda)$
- Implementación del modelo en la herramienta de simulación seleccionada: Comsol Multiphysics.
- Se propone crear una herramienta de simulación open-source en Nanohub, para solucionar problemas pequeños de simulación. Esto puede ser un desarrollo del grupo de investigación de computación de la Universidad Tecnológica de Bolívar.

7. ANEXOS

ANEXO 1

```
using System;
using System.Collections.Generic;
using System.Linq;
using System.Text;
namespace hydroExtreme1 {
using MPI;
// The DoubleComplex structure resides
in the Extreme
namespace.
using Extreme;
// The delegate classes reside in the
Extreme.Mathematics
// namespace.
using Extreme.Mathematics;
// We also use the
Extreme.Mathematics.SpecialFunctions
namespace.
using
Extreme.Mathematics.SpecialFunctions;
// calculus part
using Extreme.Mathematics.Calculus;
class Program {
static void Main(string[] args) {
using (new MPI.Environment(ref args))
{
Communicator comm =
Communicator.world;

Console.WriteLine("Check from
process " +comm.Rank);
if (comm.Rank == 0) {
double Ec = 1, Ev = 1, T = 1, Nv = 1,
Nc = 1;
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: calculating Ef");
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: " + "Ef as calculated is: " +
Ef(Ec, Ev, T, Nv, Nc));
} else if (comm.Rank==1){
double Eg = 1, me = 1, mn = 1, r = 1;
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: calculating Excited Energy");
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status:" + "Excited Energy as calculated
is: " + energyExcited(Eg,me, mn, r));
} else if (comm.Rank == 2) {
double Jsc = 1, T = 1, V = 1, Voc = 1, n
= 1;
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: calculating J");
```

```

Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: " + "J as calculated is: " + J(Jsc,
T, V, Voc, n));
} else if (comm.Rank == 3) {
double Io = 1, V = 1, Il = 1, Rs = 1, Rsh
= 1, Ip = 1, n
= 1, T = 1;
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: calculating I");
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: " + "I as calculated is: " + I(Io,
V, Il, Rs, Rsh, Ip, n, T));
} else {
Console.WriteLine("Process " +
comm.Rank + "
status: Idle");
/*All processes join here*/
comm.Barrier();
/*All processes completed*/
if (comm.Rank == 0) {
Console.WriteLine("All processes
finished"); }
}/* End of MPI Environment
namespace */
}
/*Mathematical functions listed below*/
static double Ef(double Ec, double Ev,
double T, double Nv,
double Nc) {

```

```

double Ef, t1, t2, t3, K;
K = 1.3806503e-23;
t1 = (Ec+Ev)/2;
t2 = (K*T)/2;
t3 =
ElementaryFunctions.Log1PlusX((Nv -
Nc) / Nc);
Ef = t1 + (t2*t3);
return Ef;
}
static double energyExcited(double Eg,
double me, double
mn, double r) {
double Ex, h, Epsilon, q, t1, t2, t3;
h = 6.62606896e-23;
Epsilon = 8.8541878176e-12;
q = -1.602176487e-19;
t1 = ElementaryFunctions.Pow(h, 2) / (8
*
ElementaryFunctions.Pow(r, 2));
t2 = (1/me)+(1/mn);
t3 = (1.8 * ElementaryFunctions.Pow(q,
2))/(Epsilon*r);
Ex = Eg + (t1*t2) - t3;
return Ex;
}
static double J(double Jsc, double T,
double V, double Voc, double n) {
double J, K, t1, t2, t3, q;
K = 1.3806503e-23;
q = -1.602176487e-19;
t1 = q*(V-Voc);

```

```

t2 = t1 / (n * K * T);
t3 =
ElementaryFunctions.ExpMinus1(t2);
J = -1 * Jsc * (t3);
return J;
}
static double I(double Io, double V,
double I1, double Rs,
double Rsh, double Ip, double n, double
T) {
double K, t1, t2, t3, t4, q, I;
K = 1.3806503e-23;
q = -1.602176487e-19;
t1 = q * (V + (I1 * Rs));
t2 = n * K * T;
t3 =
ElementaryFunctions.ExpMinus1(t1/t2)
;
t4 = (V + (I1 * Rs)) / Rsh;
I = (Io * t3) + t4 - Ip;
return I;
} }

```

ANEXO 2

```
# FIRST ATLAS RUN TO FIND
SHORT CIRCUIT CURRENT AND
OPEN CIRCUIT VOLTAGE
go atlas
mesh infile=solarex01_0.str
# set contact material to be opaque
material material=Aluminum
imag.index=1000
material material=Silicon taun0=1e-6
taup0=1e-6
# set light beam using solar spectrum
from external file
beam num=1 x.origin=10.0 y.origin=-
2.0 angle=90.0
power.file=solarex01.spec
# saves optical intensity to solution files
output opt.int
models conmob fldmob consrh print
solve init
solve previous
# get short circuit current
log outf=solarex01_0.log
solve b1=1
extract name="short_circuit_current"
max(abs(i."cathode"))
save outf=solarex01_1.str
# get open circuit voltage
solve init
solve previous
contact name=cathode current
solve icathode=0 b1=1
```

```
extract name="open_circuit_voltage"
max(abs(vint."cathode"))
save outf=solarex01_2.str
tonyplot solarex01_2.str -set
solarex01_2.set
# SECOND ATLAS RUN FOR
SPECTRAL RESPONSE
go atlas
mesh infile=solarex01_0.str
# set contact material to be opaque
material material=Aluminum
imag.index=1000
material material=Silicon taun0=1e-6
taup0=1e-6
# set monochromatic light beam for
spectral analysis
beam num=1 x.origin=10.0 y.origin=-
2.0 angle=90.0
# saves optical intensity to solution files
output opt.int
models conmob fldmob consrh print
# spectral response
solve init
solve previous
solve previous b1=0
log outf=solarex01_2.log
solve b1=1 beam=1 lambda=0.3
wstep=0.025 wfinal=1.0
tonyplot solarex01_2.log -set
solarex01_3.set
extract init inf="solarex01_2.log"
```



```

extract name="EQint"
curve(elect."optical wavelength", \
-(i."anode")/elect."available photo
current") outf="EQint.dat"
extract name="EQext"
curve(elect."optical wavelength", \
-(i."anode")/elect."source photo
current") outf="EQext.dat"
tonyplot EQint.dat -overlay EQext.dat -
set solarex01_1.set
# THIRD RUN FOR I-V
CHARACTERISTICS
go atlas
mesh infile=solarex01_0.str
# set contact material to be opaque
material material=Aluminum
imag.index=1000
material material=Silicon taun0=1e-6
taup0=1e-6
# set light beam using solar spectrum
from external file
beam num=1 x.origin=10.0 y.origin=-
2.0 angle=90.0
power.file=solarex01.spec
# saves optical intensity to solution files
output opt.int
# saves beam intensity to the log files
probe name=inten beam=1 intensity
models conmob fldmob consrh
solve init
solve previous
log outfile=solarex01_3.log

solve vcathode=-0.01 vstep=-0.01
vfinal=-1*$open_circuit_voltage
name=cathode
log off
solve init
solve previous
solve b1=1
log outfile=solarex01_4.log
solve vcathode=-0.01 vstep=-0.01
vfinal=-1*$open_circuit_voltage \
name=cathode b1=1
log off
tonyplot solarex01_3.log -overlay
solarex01_4.log -set solarex01_4.set
extract init infile="solarex01_4.log"
extract name="Jsc (mA/cm2)"
$short_circuit_current*1e08*1e03/20
extract name="Power"
curve(v."cathode", (v."cathode" *
i."cathode" *(-1))) \
outf="P.dat"
extract name="Pmax"
max(curve(v."cathode", (v."cathode" *
i."cathode" *(-1))))
extract name="V_Pmax" x.val from
curve(v."cathode",
(v."cathode"*i."cathode"))\
where y.val=(-1)*$"Pmax"
extract name="Fill Factor"
($"Pmax"/($"short_circuit_current"*$o
pen_circuit_voltage))

```

```
extract name="intens"
```

```
max(probe."inten")
```

```
extract name="Eff"
```

```
($Pmax/($"intens"*20/1e8))
```

```
tonyplot P.dat
```

```
quit
```

ANEXO 3

- go atlas
- mesh space.mult=1.0
- x.mesh loc=0.0 spacing=10.0
- x.mesh loc=10.0 spacing=10.0
- y.mesh loc=0.0 spacing=0.2
- y.mesh loc=50.0 spacing=0.2
- region num=1 material=Silicon
- #
- elec name=cathode bottom
- #
- doping uniform conc=1e14 n.type
- # define a beam (be sure to include REFLECT and BACK parameters)
- beam num=1 x.origin=5.0 y.origin=-1.0 angle=90.0 \
- back.refl front.refl reflect=5 min.w=-2 max.w=2 \
- min.power=0.001
- solve init

log outf=optoex09_noarc.log

solve b1=1 lambda=0.3 index.check

solve b1=1 lambda=0.325 index.check

solve b1=1 lambda=0.35 index.check

solve b1=1 lambda=0.375 index.check

solve b1=1 lambda=0.4 index.check

solve b1=1 lambda=0.425 index.check

solve b1=1 lambda=0.45 index.check

solve b1=1 lambda=0.475 index.check

solve b1=1 lambda=0.5 index.check

solve b1=1 lambda=0.525 index.check

solve b1=1 lambda=0.55 index.check

solve b1=1 lambda=0.575 index.check

solve b1=1 lambda=0.6 index.check

solve b1=1 lambda=0.625 index.check

solve b1=1 lambda=0.65 index.check

solve b1=1 lambda=0.675 index.check

solve b1=1 lambda=0.7 index.check

solve b1=1 lambda=0.725 index.check

solve b1=1 lambda=0.75 index.check

solve b1=1 lambda=0.775 index.check

solve b1=1 lambda=0.8 index.check

log off

go atlas

mesh space.mult=1.0

x.mesh loc=0.0 spacing=10.0

x.mesh loc=10.0 spacing=10.0

y.mesh loc=0.0 spacing=0.2

y.mesh loc=50.0 spacing=0.2

region num=1 material=Silicon

#

elec name=cathode bottom

#

doping uniform conc=1e14 n.type

define a beam (be sure to include REFLECT and BACK parameters)

beam num=1 x.origin=5.0 y.origin=-1.0 angle=90.0 \

back.refl front.refl reflect=5 min.w=-2 max.w=2 \

min.power=0.001

#define anti-reflective coating

```

interface optical ar.index=2.05
ar.thick=0.07 p1.x=0.0 p1.y=0.0
p2.x=10.0 p2.y=0.0
solve init
log outf=optoex09_1arc.log
solve b1=1 lambda=0.3 index.check
solve b1=1 lambda=0.325 index.check
solve b1=1 lambda=0.35 index.check
solve b1=1 lambda=0.375 index.check
solve b1=1 lambda=0.4 index.check
solve b1=1 lambda=0.425 index.check
solve b1=1 lambda=0.45 index.check
solve b1=1 lambda=0.475 index.check
solve b1=1 lambda=0.5 index.check
solve b1=1 lambda=0.525 index.check
solve b1=1 lambda=0.55 index.check
solve b1=1 lambda=0.575 index.check
solve b1=1 lambda=0.6 index.check
solve b1=1 lambda=0.625 index.check
solve b1=1 lambda=0.65 index.check
solve b1=1 lambda=0.675 index.check
solve b1=1 lambda=0.7 index.check
solve b1=1 lambda=0.725 index.check
solve b1=1 lambda=0.75 index.check
solve b1=1 lambda=0.775 index.check
solve b1=1 lambda=0.8 index.check
log off
go atlas
mesh space.mult=1.0
x.mesh loc=0.0 spacing=10.0
x.mesh loc=10.0 spacing=10.0
y.mesh loc=0.0 spacing=0.2

```

```

y.mesh loc=50.0 spacing=0.2
region num=1 material=Silicon
#
elec name=cathode bottom
#
doping uniform conc=1e14 n.type
# define a beam (be sure to include
REFLECT and BACK parameters)
beam num=1 x.origin=5.0 y.origin=-1.0
angle=90.0 \
back.refl front.refl reflect=5 min.w=-2
max.w=2 \
min.power=0.001
#define anti-reflective coating
interface optical material=Oxide
ar.thick=0.06 \
x.min=0.0 y.min=0.0 x.max=10.0
y.max=0.0 z.min=0 z.max=10
interface optical material=Nitride
ar.thick=0.05 coating=1 layer=2
solve init
log outf=optoex09_2arc.log
solve b1=1 lambda=0.3 index.check
solve b1=1 lambda=0.325 index.check
solve b1=1 lambda=0.35 index.check
solve b1=1 lambda=0.375 index.check
solve b1=1 lambda=0.4 index.check
solve b1=1 lambda=0.425 index.check
solve b1=1 lambda=0.45 index.check
solve b1=1 lambda=0.475 index.check
solve b1=1 lambda=0.5 index.check
solve b1=1 lambda=0.525 index.check

```

```
solve b1=1 lambda=0.55 index.check
solve b1=1 lambda=0.575 index.check
solve b1=1 lambda=0.6 index.check
solve b1=1 lambda=0.625 index.check
solve b1=1 lambda=0.65 index.check
solve b1=1 lambda=0.675 index.check
solve b1=1 lambda=0.7 index.check
solve b1=1 lambda=0.725 index.check
solve b1=1 lambda=0.75 index.check
solve b1=1 lambda=0.775 index.check
solve b1=1 lambda=0.8 index.check
tonyplot -overlay optoex09_noarc.log
optoex09_1arc.log optoex09_2arc.log -
set optoex09.set
quit
```

8. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

-
- ¹ A. Damitha T. Adikaari, D. M. Nanditha M. Dissanayake, & S. Ravi P. Silva. Organic-Inorganic Solar Cells: Recent Developments and Outlook. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. Feb. 2010, No.16, p.1595-1606. ISSN 1077-260X.
- ² K. Aitola, A. Kaskela. Et. Al. Single-Walled Carbon Nanotube Thin-Film Counter Electrodes for Indium Tin Oxide-Free Plastic Dye Solar Cells. *Journal of The Electrochemical Society*. 2010. Vol. 157. 0013-4651. B1831-B1837
- ³ R.R. Bacsa, E. Flahaut, Ch. Laurent, A. Peigney, P. Puech and W.S. Bacsa. "Technical Proceedings of the 2004 NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show", Volume 3. Pags. 214 – 217.
- 4 Corporacion Nec's fundamental research laboratories. [En linea]. Disponible: www.labs.nec.co.jp
- 5 A. Maroto Valiente. "Jornada científico-tecnologica: Nanotubos de Carbono". Octubre, 2007.
- 6 A. Maroto Valiente. "Jornada científico-tecnologica: Nanotubos de Carbono". Octubre, 2007.
- 7 Revista colombiana de fisica, vol.36, no.2, 2004
- ⁸ A. Maroto Valiente. "Jornada científico-tecnologica: Nanotubos de Carbono". Octubre, 2007.
- ⁹ R. Yeontack, F. Dallas & Y. Choongho. High Electrical Conductivity and N-Type Thermopower from Double-/Single-Wall Carbon Nanotubes by Manipulating Charge Interactions between Nanotubes and Organic/Inorganic Nanomaterials. Carbon. Nov.2011, Volume 49, Issue 14, p. 4745-4751.
- ¹⁰ M. Dutta & D. Basak. Photosensitization Of Multiwalled Carbon Nanotube Scaffolds With ZnO Quantum Dots For Photovoltaic Applications. Journal of Nanoparticle Research. Jul. 2011, p. 1-9. ISSN 1388-0764.
- ¹¹ L. Zhongrui, Z. Liqiu, S. Viney, B. Shawn, D. Enkeleda & B. Alexandru. Solar Cells With Graphene And Carbon Nanotubes On Silicon. NSTI-Nanotech. 2010, Vol. 1, p. 274-277. ISBN 978-1-4398-3401-5.
- ¹² Glatkowski, P.; Turevskaya, E.; Britz, D.; Rich, D.; DiCologero, M.; Kelliher, T.; Sennott, J.; Landis, D.; Braden, R.; Mack, P.; Piche, J. (2009). Carbon nanotube transparent electrodes: A case for photovoltaics. 34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), (págs. 001302 - 001305). Philadelphia.

-
- ¹³ S. Hwang, J. Moon, S. Lee, D.-H. Kim, D. Lee, W. Choi & M. Jeon. Carbon Nanotubes As Counter Electrode For Dye-Sensitized Solar Cells. *Electron. Lett.* Dec. 2007, Vol. 43, Issue 25, p.1455–1456.
- ¹⁴ A. Mathew, G. Mohan & N. Munichandraiah. Dye Sensitized Solar Cell Based on Platinum Decorated Multiwall Carbon Nanotubes as Catalytic Layer on the Counter Electrode. *Materials Research Bulletin*. Oct. 2011. Vol. 46, Issue 10, p. 1535-1754.
- ¹⁵ SEFIN, Red de Nanotecnologías para energía de la Región Iberoamericana. [En Línea]. Disponible: <http://www.nanoenergia.org/participantes.php?Grupo=8>
- ¹⁶ TELEFONICA, Blogs de Ciencia y Tecnología de Fundación Telefónica: Nanotecnología, Innovación Tecnológica y Transformación Social en i-Europa. [En Línea]. Disponible: <http://blogs.creamoselfuturo.com/nano-tecnologia/2010/07/26/silicio-poroso-2/>
- ¹⁷ F. Mesa, J. M. Murillo & A. Dussan. Estudio Del Comportamiento De Los Contactos Eléctricos De Al Y Ag Y Su Correlación Con La Conductividad Eléctrica En Películas Delgadas De Cu₃BiS₃. *Revista Colombiana de Física*. Abril 2011. Vol. 43, No.1. p. 175-180.
- ¹⁸ COLCIENCIAS, GrupLAC - Plataforma SCienTI. [En Línea]. Disponible: <http://201.234.78.173:8080/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000005603>
- ¹⁹ G. Gordillo, A. Téllez, C. Calderón, P. Bartolo-Pérez & E. Romero. Preparación y Caracterización de Películas Delgadas de SnS Crecidas Electroquímicamente. *Revista Colombiana de Física*, Enero 2009. Vol. 41, No. 1. p. 95-98.
- ²⁰ Liang, W Y. Excitons. *Physics Education*. Vol. 5. No.4. 1970
- ²¹ Ben G. Streetman, Santay Kumar Banerjee; *Solid State Electronic Devices* (6th Edition), Pearson International Edition; pp. 126–135.
- ²² W.F. Smith, *Foundations of Materials Science and Engineering 3rd ed.*, McGraw-Hill (2004)
- ²³ En línea [Disponible]: Photovoltaics. Engineering.com. <http://www.engineering.com/SustainableEngineering/RenewableEnergyEngineering/SolarEnergyEngineering/Photovoltaics/tabid/3890/Default.aspx> (Consultado 2011-11-24)
- ²⁴ P. Glatkowski, E. Turevskaya, D. Britz, D. Rich, M. DiCologero, T. Kelliher, J. Sennott, D. Landis, R. Braden, P. Mack, J. Piche. 2009. Carbon nanotube transparent electrodes: A case for photovoltaics. 34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), (p. 001302 - 001305). Philadelphia
- ²⁵ A. Mathew, G. Mohan & N. Munichandraiah. Dye Sensitized Solar Cell Based on Platinum Decorated Multiwall Carbon Nanotubes as Catalytic Layer on the Counter Electrode. *Materials Research Bulletin*. Oct. 2011. Vol. 46, Issue 10, p. 1535-1754.

-
- ²⁶ K. Aitola, J. Halme, N. Halonen, A. Kaskela, M. Toivola, A. Nasibulina, K. Kordás, G. Tóth, E. Kauppinena, & P. Lunda. Comparison of dye solar cell counter electrodes based on different carbon nanostructures. *Thin Solid Films*. 2011, Vol. 519, p. 8125-8134.
- ²⁷ D.W. Zhang, X.D. Li, H.B. Li, S. Chen, Z. Sun, X.J. Yin & S.M. Huang. Graphene-based counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2011. Vol. 49, Issue 13. P. 4610 – 4613. ISSN 0008-6223.
- ²⁸ T. Battumur, S. Mujawar, Q.T. Truong, S. Ambade, D. Lee, W. Lee, S.H. Han & S.H. Lee. Graphene/carbon nanotubes composites as a counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Current Applied Physics*. 2011, ISSN 1567-1739.
- ²⁹ S. Del Gobbo, P. Castrucci, M. Scarselli, L. Camilli, M. De Crescenzi, L. Mariucci, A. Valletta, A. Minotti & G. Fortunato. Carbon nanotube semitransparent electrodes for amorphous silicon based photovoltaic devices. *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 98, Issue 18. p. 183113 - 183113-3. ISSN 0003-6951.
- ³⁰ C. Jikun, L. Kexin, L. Yanhong, G. Xiaozhi, L. Dongmei, D. Minghui, H. Shuqing, M. Qingbo. A flexible carbon counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Carbon*. 2009. Vol. 47. P. 2704 – 2708.
- ³¹ O. Topon, D. Matsumoto & M. Inaguma. Carbon Nanotubes Counter Electrode for Dye-Sensitized Solar Cell. *Fujikura Technical Review*. 2011. P. 47 – 50.
- ³² W. Mingxing, L. Xiao, W. Tonghua, Q. Jieshan & M. Tingli. Low-cost dye-sensitized solar cell based on nine kinds of carbon counter electrodes. *Energy Environ. Sci*. 2011. Vol 4. P. 2308-2315.
- ³³ D. Tune, B. Flavel, J. Quinton, A. Ellis, J. Shapter. Single walled carbon nanotube network electrodes for dye solar cells. *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 2010. Vol 94. P 1665–1672.
- ³⁴ G. Calogero, F. Bonaccorso, O. M. Maragò, P. G. Gucciardi & G. Di Marco. *Dalton Trans.*, 2010, Vol. 39. P. 2903-2909.
- ³⁵ T. Sawatsuk, A. Chindaduang, C. Sae-kung, S. Pratontep & G. Tumcharern. Dye-sensitized solar cells based on TiO₂–MWCNTs composite electrodes: Performance improvement and their mechanisms. *Diamond & Related Materials*. 2009. Vol. 18. P. 524–527.
- ³⁶ N. Pimparkar, M. Chowalla, & M. A. Alam. Device optimization for organic photovoltaics with CNT networks as transparent electrode. *Novel Materials and Devices*. 2008. 978-1-4244-1641-7/0. P. 1-4

-
- ³⁷ K. Aitola, A. Kaskela. Et. Al. Single-Walled Carbon Nanotube Thin-Film Counter Electrodes for Indium Tin Oxide-Free Plastic Dye Solar Cells. *Journal of The Electrochemical Society*. 2010. Vol. 157. 0013-4651. B1831-B1837
- ³⁸ Simulating Solar Cell Devices Using Silvaco TCAD Tools. 2008. *The Simulation Standard*. Vol. 18, No. 2. Pags 1-3.
- ³⁹ Simulation of Solar Cell with Silvaco ATLAS. Aalto University. 2010.
- ⁴⁰ S. Michael, A. D. Bates, M. S. Green. Silvaco Atlas as a Solar Cell Modeling Tool. 2005. 0-7803-8707-4. Pags. 719-721.
- ⁴¹ MEDICI. TCAD Produc Information. © 2001 Avant! Corporation
- ⁴² Multi Scale Modeling of Nano Enable Solar cell With Implementation on an HPC Setup. R. Pathak, S. Joshi & P. Kotak. Kharagpur, India: IEEE, 2009. Third International Conference on Power Systems. 978-1-4244-4331-4.
- ⁴³ J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>
- ⁴⁴ J. L. Gray (2011), "Solar Cells Lecture 3: Modeling and Simulation of Photovoltaic Devices and Systems," <https://nanohub.org/resources/11690>
- ⁴⁵ Dragica Vasileska; Gerhard Klimeck (2010), "Solar Cells Operation and Modeling," <https://nanohub.org/resources/9328>
- ⁴⁶ Dragica Vasileska (2011), "SILVACO Simulation of Solar Cells," <https://nanohub.org/resources/10770>.
- ⁴⁷ JAGLARZ, Janusz. Polymeric Photovoltaic Devices. [en línea]. Cracovia (Polonia): Instituto de fisica de la Universidad de Cracovia. 2004. p.1 <www.materialscience.pwr.wroc.pl/ci/articles/ms_2004_055.pdf>. P. 6 [consulta: Diciembre de 2004].
- ⁴⁸ Luat T. Vuong, Gregory Kozyreff, Rafael Betancur y Jordi Martorell, *Appl.Phys. Lett.* 95, 233106 2009.
- ⁴⁹ Sintesis de nanoparticulas semiconductoras recubiertas con almidon. Patricia Rodriguez Fragoso. Mexico DF. Junio 2008. Instituto politécnico nacional. Centro de investigación en ciencia aplicada y tecnología avanzada